

Mikroskopische Analyse optoelektronischer Eigenschaften von Halbleiterverstärkungsmedien für Laseranwendungen

Dissertation
zur
Erlangung des Doktorgrades
der Naturwissenschaften
(Dr. rer. nat.)

dem Fachbereich Physik
der Philipps-Universität Marburg
vorgelegt

von
Christina Bückers
aus Kvelaer

Marburg/Lahn, 2010

Vom Fachbereich Physik der Philipps-Universität Marburg
als Dissertation angenommen am 19.11.2010

Erstgutachter: Prof. Dr. S. W. Koch
Zweitgutachter: Prof. Dr. W. Stolz

Tag der mündlichen Prüfung: 3.12.2010

Teilergebnisse dieser Arbeit waren Gegenstand verschiedener Veröffentlichungen.
Eine Liste befindet sich am Ende der Arbeit auf Seite 131.

Inhaltsverzeichnis

1. Einleitung	1
2. Mikroskopische Beschreibung optoelektronischer Eigenschaften von Halbleiterlaserstrukturen	3
2.1. Elektronische Bandstruktur	3
2.1.1. $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Störungsrechnung	4
2.1.2. Bandstruktur von Quantenfilmen	5
2.1.3. Dipol- und Coulomb-Matrixelemente	7
2.2. Absorption und optische Verstärkung	8
2.2.1. Absorption in Quantenfilmen	8
2.2.2. Einfluss der dielektrischen Umgebung auf die Absorption	12
2.3. Lumineszenz	14
2.3.1. Spontane Emission in Quantenfilmen	14
2.3.2. Einfluss der dielektrischen Umgebung auf die spontane Emission	17
2.4. Ladungsträgerverluste	18
2.4.1. Strahlende Verluste	18
2.4.2. Auger-Verluste	19
3. (AlGaIn)As-basierte VECSEL-Systeme	23
3.1. Konzept des VECSEL-Systems	23
3.1.1. Funktionsprinzip	24
3.1.2. Pumpmethoden	25
3.2. Aufbau der Halbleiterstruktur	27
3.3. Optische Charakterisierung	30
3.3.1. Analyse des Reflektivitätsspektrums	30
3.3.2. Analyse des Photolumineszenzspektrums	33
3.4. Lasereigenschaften	35
3.4.1. Optische Verstärkung	35
3.4.2. Ladungsträgerverluste	39
3.5. Effektivität des optischen <i>In-Well</i> -Pumpens	40
4. (AlGaIn)(AsSb)-basierte Laserstrukturen	45
4.1. Einführung in das Materialsystem	45
4.2. Optische Charakterisierung	46
4.2.1. Entwurf von Quantenfilmstrukturen	46

4.2.2.	Methode der photomodulierten Reflexion	48
4.2.3.	Vergleich theoretischer und experimenteller photomodulierter Reflektivitätsspektren	51
4.3.	Optische Verstärkung	54
4.3.1.	Vergleich theoretischer und experimenteller Verstärkungsspektren	55
4.3.2.	Analyse der Verstärkungseigenschaften	57
4.4.	Laserverluste	60
4.4.1.	Analyse der Ladungsträgerverlustmechanismen	60
4.4.2.	Auswertung des Verluststroms an der Laserschwelle	62
4.5.	Designstudien	65
5.	Ga(NAsP)-basiertes Materialsystem	69
5.1.	Einführung in das Materialsystem	69
5.1.1.	Ga(NAsP) für die Silizium-Photonik	69
5.1.2.	Elektronische Struktur von verdünnt stickstoffhaltigen Halbleitermaterialien	70
5.2.	Einfluss von Stickstoff auf die Bandstruktur	72
5.2.1.	Erweiterung der $k \cdot p$ -Matrix	72
5.2.2.	Auswertung der elektronischen Bandstruktur	74
5.2.3.	Einfluss des stickstoffartigen Charakters für die elektronische Zustandsdichte	75
5.2.4.	Emissionswellenlänge und BAC-Parameter	76
5.3.	Elektromodulierte Reflexion	78
5.3.1.	Methode der elektromodulierten Reflexion	78
5.3.2.	Vergleich theoretischer und experimenteller elektromodulierter Reflektivitätsspektren	81
5.3.3.	Ergebnisse für weitere Probenstrukturen	83
5.4.	Photolumineszenz und Ladungsträgerverlustmechanismen	85
5.4.1.	Vergleich theoretischer und experimenteller Photolumineszenzspektren	86
5.4.2.	Analyse der Rekombinationsprozesse	88
5.5.	Optische Verstärkung	90
5.5.1.	Einordnung der Verstärkungseigenschaften	90
5.5.2.	Vergleich theoretischer und experimenteller Verstärkungsspektren	92
6.	Ga(AsBi)-basiertes Materialsystem	97
6.1.	Einführung in das Materialsystem	97
6.2.	Einfluss von Bismut auf die Bandstruktur	98
6.2.1.	Erweiterung der $k \cdot p$ -Matrix	98
6.2.2.	Emissionswellenlänge und VBAC-Parameter	99
6.3.	Einfluss der Bandanordnung auf die optischen Eigenschaften	100
6.3.1.	Leitungsbandoffset	101
6.3.2.	Charakterisierung der Bandanordnung	102
6.4.	Optische Verstärkung und Laserverluste	104

7. Zusammenfassung	109
A. Probenstrukturen	113
A.1. (AlGaIn)As-basierte VECSEL-Struktur	113
A.2. (AlGaIn)(AsSb)-basierte Strukturen	114
A.3. Ga(NAsP)-basierte Strukturen	115
A.4. Ga(AsBi)-basierte Strukturen	116
Literaturverzeichnis	117
Veröffentlichungen	131

1. Einleitung

Halbleiterlaser zeichnen sich durch ihre hohe Effizienz, eine lange Lebensdauer und eine kompakte Bauform mit einer Größe im Bereich von Kubikmillimetern aus [1]. Wesentlicher Grundbaustein des Lasers ist das Verstärkungsmedium; durch die Auswahl eines geeigneten Materialsystems lassen sich Emissionswellenlängen vom Ultravioletten bis ins Infrarote realisieren. Damit finden Halbleiterlaser in vielen Bereichen Anwendung, z. B. in der Medizintechnik, der Materialbearbeitung, der Umweltanalytik oder der optischen Datenübertragung. So vielfältig wie die Anwendungsgebiete sind die daraus resultierenden Anforderungen an die Systeme. Um die Halbleiterlaser im Hinblick auf spezifische Anwendungen systematisch weiterzuentwickeln und zu verbessern, bietet sich eine quantitative Analyse der Materialeigenschaften des Verstärkungsmediums und der zugrunde liegenden mikroskopischen Prozesse an.

Vor diesem Hintergrund wird eine mikroskopische Theorie angewendet, mit der die optoelektronischen Eigenschaften von Halbleiterverstärkungsmaterialien modelliert und analysiert werden. Gegenstand dieser Arbeit sind detaillierte Theorie-Experiment-Vergleiche, die zeigen, wie die Theorie genutzt werden kann, um wenig bekannte Struktur- und Materialparameter zu bestimmen und die das Laserverhalten bestimmenden physikalischen Prozesse zu charakterisieren. Auf dieser Basis lassen sich Lasereigenschaften prognostizieren und Strukturen optimieren. Dies gewinnt für moderne Lasersysteme zunehmend an Bedeutung, weil sie ausgesprochen klein sind, quantenmechanische Effekte zum Tragen kommen und die Eigenschaften von einer Vielzahl von Parametern beeinflusst werden – das kann auf experimenteller Ebene allein nicht mehr geleistet werden. Dementgegen können mit Hilfe der Theorie einzelne Effekte der ineinander verwobenen Mechanismen isoliert und im Einzelnen aufgeklärt werden. Dass sich durch die theoretischen Analysen materialaufwändige Versuchsreihen sowie deren Auswertung erübrigen, kommt hinzu.

Die verwendete Theorie beschreibt das Verstärkungselement, das sich typischerweise aus mehreren Halbleiterquantenfilmen aufbaut, als Vielteilchensystem. Unter Berücksichtigung der Vielteilchenwechselwirkungen werden mikroskopische Größen aus quantenmechanischen Bewegungsgleichungen bestimmt, mit denen sich makroskopische Größen ableiten lassen. Auf diese Weise können Absorptionsspektren, Brechungsindexänderungen, optische Verstärkungsspektren, Lumineszenzspektren und die intrinsischen Ladungsträgerverluste durch strahlende sowie Auger-Rekombinationsprozesse quantitativ berechnet werden. In die Berechnungen werden auch innerstrukturelle Resonanzen eingebunden.

Die genannten Eigenschaften lassen sich nutzen, um mit Hilfe von Variationsrechnungen unbekannte und experimentell schwer zugängliche Material- und Strukturparameter zu bestimmen: Ausgehend von experimentellen Spektren führt man entsprechende Simulationen mit dem Modell durch, wobei die unbekannte Größe variiert wird. Wenn die Spektren übereinstimmen, ist

damit die Größe ermittelt. Mit dem so gewonnenen Verständnis für das Material lassen sich optische Verstärkungsspektren sowie die Ladungsträgerverluste bestimmen, so dass das Verhalten von Lasersystemen, wie Emissionswellenlänge und Laserschwelle, berechenbar wird.

Die Untersuchungen zu charakteristischen Eigenschaften - insbesondere Absorption, Verstärkung, Lumineszenz und Laserverluste - bilden den Leitfaden zur Charakterisierung verschiedenster Materialsysteme. Beschreibungen von ähnlich angelegten Untersuchungen finden sich beispielsweise in [2, 3]. Vorgestellt werden vier Materialklassen: Aluminium-Gallium-Indium-Arsenid ((AlGaIn)As), Aluminium-Gallium-Indium-Arsenid-Antimonid ((AlGaIn)(AsSb)), Gallium-Nitrid-Arsenid-Phosphid (Ga(NAsP)) und Gallium-Arsenid-Bismutid (Ga(AsBi)). Sie unterscheiden sich u. a. in ihrer Emissionswellenlänge und Integrierbarkeit in Bauelemente, und so finden sie in verschiedenen Bereichen Anwendung. Das (AlGaIn)(AsSb)-basierte Materialsystem etwa wird als Lasermedium in der medizinischen Diagnostik und der Umweltanalytik eingesetzt, während das Ga(NAsP)-basierte Materialsystem als Lasermedium zur Herstellung von optoelektronisch integrierten Schaltungen von technologischem Interesse ist.

Die vier vorgestellten Materialsysteme stehen nicht auf dem gleichen Entwicklungsstand. Mit der Kapitelprogression richtet sich der Blick ausgehend von einem etablierten Materialsystem zunehmend auf neuartigere bis hin zu einem bislang kaum realisierten System. Somit erhalten die aus der Theorie gewonnen Aussagen immer mehr an prognostischem Wert.

Kapitel 2 gibt einen Überblick über die mikroskopische Theorie, die zur Modellierung optoelektronischer Eigenschaften genutzt wird.

Ihr Leistungsvermögen wird am Beispiel einer (AlGaIn)As-basierten VECSEL-Struktur in Kapitel 3 belegt. Mit der Theorie lässt sich das System analysieren und zugrunde liegenden Prozesse können identifiziert werden, so dass auch Grenzen für den Laserbetrieb rechnerisch ausgelotet werden können.

In Kapitel 4 steht das (AlGaIn)(AsSb)-basierte Materialsystem im Zentrum. Auf der Basis der mikroskopischen Analyse der Lasereigenschaften lassen sich Erkenntnisse gewinnen, die für die Optimierung von Strukturen entscheidend sind.

Strukturoptimierung wird auch im Ga(NAsP)-basierten Materialsystem angestrebt. Da sich das Material im Aufbau grundlegend von konventionellen Verbindungshalbleitern unterscheidet, ist zunächst sicherzustellen, dass sich das Modell zur Beschreibung eignet. Diese Untersuchung wird in Kapitel 5 dargelegt.

Kapitel 6 thematisiert das Ga(AsBi)-basierte Materialsystem. Mit dem mikroskopischen Modell kann das Potential dieses noch wenig bekannten Systems für Laseranwendungen eingeschätzt werden.

2. Mikroskopische Beschreibung optoelektronischer Eigenschaften von Halbleiterlaserstrukturen

Die optischen Eigenschaften eines Halbleiterlasersystems werden maßgeblich durch das Verstärkungselement bestimmt. Aus diesem Grund steht die Untersuchung des laseraktiven Mediums im Mittelpunkt, das sich aus mehreren Halbleiterquantenfilmen zusammensetzt. Da die Strukturen im nanoskaligen Bereich gegliedert sind und einzelne Schichten oft nur aus wenigen Atomlagen bestehen, müssen für eine grundlegende Beschreibung des Systems quantenmechanische Methoden herangezogen werden. Das Verständnis der mikroskopischen Prozesse und ihre numerische Modellierung ermöglichen schließlich die quantitative Analyse und Prognose relevanter optoelektronischer Materialeigenschaften. Mit Hilfe des quantenkinetischen Zugangs, der im Rahmen dieser Arbeit angewendet wird, lassen sich insbesondere die Wechselwirkungen des Vielteilchensystems explizit berechnen. Damit setzt das Modell keine phänomenologischen Parameter wie z. B. Dephasierungszeiten voraus; die einzigen Angaben, die benötigt werden, sind das Layout der Heterostruktur und Materialparameter, die experimentell bestimmt und der Literatur entnommen werden können.

Der Ausgangspunkt des Modells liegt in der Berechnung der elektronischen Bandstruktur des Quantenfilmsystems (Kapitel 2.1). Auf der Basis der spezifischen Bandstruktur und der resultierenden Coulomb- und Dipolmatrixelemente lassen sich im Rahmen einer mikroskopischen Vielteilchentheorie die Absorptions- und Verstärkungseigenschaften (Kapitel 2.2), die Lumineszenz (Kapitel 2.3) und die Ladungsträgerverluste durch strahlende und Auger-Rekombinationsprozesse (Kapitel 2.4) bestimmen. Während Absorptions- und Lumineszenzuntersuchungen eine eingehende Charakterisierung von Halbleiterlaserstrukturen ermöglichen, kann mit der Analyse der Verstärkungseigenschaften und Verlustmechanismen ein Beitrag zur anwendungsnahen Optimierung von Halbleiterlasersystemen geleistet werden.

2.1. Elektronische Bandstruktur

Der Einfluss des Kristallpotentials auf ein Valenzelektron in einem Halbleiter führt zu einer elektronischen Bandstruktur mit erlaubten und verbotenen Energiebereichen. Um die Bandstruktur eines spezifischen Quantenfilmsystems zu berechnen, wird die $k \cdot p$ -Methode angewendet, mit der die Energieeigenwerte und Eigenzustände eines Elektrons an einer beliebigen Stelle in der Band-

struktur aus der Kenntnis der Energien und Zustände an einem festen Punkt der Brillouin-Zone, speziell dem Γ -Punkt, extrapoliert werden können. Für direkte Halbleitermaterialien gelingt damit eine Beschreibung der elektronischen Bandstruktur in der Umgebung der Bandkante, wo optische Übergänge vorwiegend stattfinden, und die folglich für die Halbleiteroptik im Hinblick auf Laseranwendungen von Interesse ist.

2.1.1. $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Störungsrechnung

Die Bewegung eines einzelnen Elektrons im Kristallvolumen wird durch die Schrödinger-Gleichung

$$\hat{\mathcal{H}}_{\text{Einteilchen}} \psi_{n,\vec{k}}(\vec{r}) \equiv \left(\frac{\hat{p}^2}{2m_0} + V(\vec{r}) \right) \psi_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = E_{n,\vec{k}} \psi_{n,\vec{k}}(\vec{r}) \quad (2.1)$$

beschrieben [4, 5]. Der Einteilchen-Hamilton-Operator $\hat{\mathcal{H}}_{\text{Einteilchen}}$ setzt sich aus dem kinetischen Beitrag, der durch die freie Elektronenmasse m_0 und den Impulsoperator \hat{p} definiert wird, und dem lokalen Gitterpotential $V(\vec{r})$, das durch die periodische Anordnung der Atomrümpfe zustande kommt, zusammen, wobei \vec{r} den dreidimensionalen Ortsvektor bezeichnet. Die Wellenfunktion $\psi_{n,\vec{k}}(\vec{r})$ und die zugehörige Energie $E_{n,\vec{k}}$ eines Elektrons in einem bestimmten Eigenzustand wird durch den Index n und den Wellenvektor \vec{k} charakterisiert, wobei die Spinquantenzahl durch eine zusätzliche Komponente im Wellenvektor erfasst sein soll. Nach dem Bloch-Theorem [4, 5] lässt sich der elektronische Eigenzustand als Produkt einer ebenen Welle und einer gitterperiodischen Funktion $w_{n,\vec{k}}(\vec{r})$, die Bloch-Funktion genannt wird, schreiben:

$$\psi_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} w_{n,\vec{k}}(\vec{r}) \quad (2.2)$$

Die Werte für den Wellenvektor \vec{k} sind durch die periodischen Randbedingungen bestimmt, mit denen bei einem endlichen Kristallvolumen Translationssymmetrie gewährleistet wird, und können auf die erste Brillouin-Zone beschränkt werden. Indem man Gl. 2.2 in Gl. 2.1 einsetzt, erhält man eine Eigenwertgleichung für die Bloch-Funktion:

$$\left(\frac{\hat{p}^2}{2m_0} + \frac{\hbar}{m_0} \vec{k} \cdot \hat{\vec{p}} + V(\vec{r}) \right) w_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = \left(E_{n,\vec{k}} - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \right) w_{n,\vec{k}}(\vec{r}) \quad (2.3)$$

Den zu $\vec{k} \cdot \hat{\vec{p}}$ proportionalen Term betrachtet man als Störung und entwickelt die Bloch-Funktion $w_{n,\vec{k}}(\vec{r})$ in die Bloch-Funktionen $w_{n,\vec{k}_0}(\vec{r})$ eines festen Punktes der Brillouin-Zone. Da für die optischen Übergänge in direkten Halbleitermaterialien speziell die Umgebung des Γ -Punktes relevant ist, werden die Bloch-Funktionen am Zentrum der Brillouin-Zone, d. h. $\vec{k}_0 = 0$, als Basis gewählt. Mittels quantenmechanischer Störungstheorie lassen sich dann die einzelnen Entwicklungskoeffizienten und Energieeigenwerte für einen beliebigen Zustand der Brillouin-Zone aus der Kenntnis der Zustände am Γ -Punkt berechnen [4, 5]. Wegen der Inversionssymmetrie tritt kein Beitrag linear in der Störung auf, und Energiekorrekturen werden in einer Störungsrechnung zweiter Ordnung bestimmt. Weil der Störterm proportional zum Wellenvektor ist, eignet sich das $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Verfahren gerade, um die elektronische Bandstruktur bei kleinen Wellenvektoren, also im Bereich der Bandextrema, zu ermitteln.

2.1.2. Bandstruktur von Quantenfilmen

Um ein Elektron in einer Quantenfilmstruktur zu beschreiben, wird der Hamilton-Operator der Schrödinger-Gleichung (Gl. 2.1) erweitert, indem zum periodischen Gitterpotential $V(\vec{r})$ ein Potential $V_{\text{qw}}(z)$, addiert wird, das durch die Bandlückenunterschiede in Wachstumsrichtung, entlang der z -Achse, zustande kommt. Die Wellenfunktionen $\Phi_{\lambda,\mathbf{k}}(\vec{r})$ des Elektrons im Quantenfilm lassen sich dann im Rahmen der Näherung der Einhüllenden [6] in die Eigenzustände $\psi_{n,\vec{k}}(\vec{r})$ des Elektrons im homogenen Volumenkristall entwickeln. In der Approximation kommen die unterschiedlichen Längenskalen des Gitterpotentials (Gitterkonstante ≈ 0.5 nm) und des überlagerten Potentials durch die Quantenfilmstruktur (Schichtdicke ≈ 5 nm) zum Tragen. Nach dem Bloch-Theorem können die Eigenzustände $\psi_{n,\vec{k}}(\vec{r})$ mit Hilfe der Bloch-Funktionen $w_{n,\vec{k}}(\vec{r})$ ausgedrückt werden, die sich wiederum in Bloch-Funktionen am Γ -Punkt $w_{n,\vec{k}_0}(\vec{r})$ entwickeln lassen (Kapitel 2.1.1). Damit erhält man für den Eigenzustand eines Elektrons im Quantenfilm

$$\Phi_{\lambda,\mathbf{k}}(\vec{r}) = \mathcal{A}^{-1} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \sum_n \zeta_{\lambda,\mathbf{k},n}(z) w_{n,\vec{k}_0}(\vec{r}), \quad (2.4)$$

wobei \mathcal{A} eine Normierungskonstante, \mathbf{r} die Projektion des Ortsvektors auf die Quantenfilmebene, \mathbf{k} den schichtparallelen Wellenvektor und $\zeta_{\lambda,\mathbf{k},n}(z)$ die Entwicklungskoeffizienten mit dem Index λ für die Quantisierung in Wachstumsrichtung bezeichnen [7, 8]. Die Summation erfolgt über die Bandindizes n der Bloch-Basisfunktionen.

Da die Beiträge von Bloch-Basisfunktionen energetisch weit entfernt liegender Bänder gering sind, kann die Summation auf die Bloch-Basisfunktionen an der Bandkante beschränkt werden. Allgemein ergeben sich die Bloch-Funktionen als Linearkombination von Atomorbitalen, die je nach Bahndrehimpuls l in s -Orbitale ($l=0$), p_x -, p_y -, bzw. p_z -Orbitale ($l=1$), usw. klassifiziert werden [5]. III-V-Halbleiter zeichnen sich durch ein s -artiges Leitungsband und ein p -artiges Valenzband aus; die damit verknüpften Zustände werden durch den Gesamtdrehimpuls j , der sich aus dem Bahndrehimpuls und dem Spin des Elektrons zusammensetzt, sowie der Einstellungsquantenzahl m_j charakterisiert. Mit der Schreibweise $|j, m_j\rangle$ ist das Leitungsband folglich durch die Zustände $|\frac{1}{2}, \pm\frac{1}{2}\rangle$ und das Valenzband durch die Zustände $|\frac{3}{2}, \pm\frac{3}{2}\rangle$, $|\frac{3}{2}, \pm\frac{1}{2}\rangle$ und $|\frac{1}{2}, \pm\frac{1}{2}\rangle$ gekennzeichnet. Sie repräsentieren im Einzelnen die zweifach spinentartete leitungsbandartige (cb), schwerlochartige (hh), leichtlochartige (lh) und Spin-Bahn-abgespaltene (so) Bloch-Basisfunktion. Damit kann die Wellenfunktion eines Elektrons in einem beliebigen Zustand im Quantenfilm als Linearkombination von acht Basisfunktionen des homogenen Volumenkristalls am Γ -Punkt dargestellt werden [7, 8]. Die Entwicklungskoeffizienten lassen sich störungstheoretisch berechnen und sind durch Matricelemente der Form $\langle w_{n,\vec{k}_0} | \mathcal{H}_{\mathbf{k},\mathbf{p}} | w_{n',\vec{k}_0} \rangle$ bestimmt.

Auf diese Weise kann die gesamte Information zur Bandstruktur des Quantenfilmsystems in einer 8×8 -Matrix zusammengefasst werden, mit der sich die Entwicklungskoeffizienten eines elektronischen Zustandes und die zugehörigen Energiekorrekturen in Störungstheorie zweiter Ordnung bestimmen lassen. Die zugrunde liegende $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Matrix für Zinkblendestrukturen, in denen die in dieser Arbeit untersuchten Halbleitermaterialien kristallisieren, ist in [9, 10] angegeben. Die Kopplung der cb-, hh-, lh-, und so-Basisfunktionen spiegelt sich in der Matrix insofern wi-

der als neben Diagonalelementen auch nicht-Diagonalelemente auftreten. Um die Bandstruktur verdünnt stickstoffhaltiger Ga(NAsP)-Materialien und bismuthaltiger (GaBi)As-Materialien zu modellieren, wird die $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Matrix zu einer 10×10 -Matrix bzw. zu einer 14×14 -Matrix erweitert (Kapitel 5.2.1 und Kapitel 6.2.1).

Zu den Materialparametern, die in die $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Matrix einfließen und somit für eine Bandstrukturechnung benötigt werden, zählen die fundamentale Bandlücke (E_g), die Spin-Bahnaufspaltung (Δ_0), das Dipolmatrixelement (p), die Luttinger-Parameter ($\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$), die effektive Elektronenmasse für das Leitungsband (m_c) und die Gitterkonstante (a_0). Spannungseffekte werden über den Pikus-Bir-Formalismus [11] eingebracht und lassen sich in zwei Anteile zerlegen: Die hydrostatische Verspannung bewirkt eine Änderung der fundamentalen Bandlücke, die tetragonale Verspannung verschiebt zum einen die Bandkanten der Valenzbänder gegeneinander, und zum anderen wirkt sie sich auf ihre Bandkrümmung aus. Die Beiträge werden durch die Spannungskoeffizienten (C_{11}, C_{12}, C_{44}), die hydrostatischen Deformationspotentiale (a_c, a_v) und das tetragonale Deformationspotential (b) festgelegt. Um die Abhängigkeit der fundamentalen Bandlücke von der Temperatur im Modell zu berücksichtigen, wird die Varshni-Formel [12] mit den empirischen Varshni-Koeffizienten (α, β) eingesetzt. Die aufgeführten, materialspezifischen Konstanten beziehen sich auf den Volumenkristall und können für binäre III-V-Halbleiter wie z. B. GaAs der Literatur [13, 14, 15] entnommen werden. Die Werte für ternäre oder quaternäre Verbindungen werden entsprechend ihrer chemischen Zusammensetzung durch eine lineare Interpolation aus den Parametern der binären Komponenten ermittelt; die Interpolation der Bandlücke wird zudem durch einen Biegeparameter (C_{bowing}) ergänzt [15].

Die Differenz der Bandlücken benachbarter Halbleiterschichten einer Heterostruktur bestimmt den Potentialverlauf für ein Elektron entlang der Wachstumsrichtung. Welchen Anteil an der Bandlückendifferenz angrenzender Schichten das Leitungsband und welchen Anteil das Valenzband trägt, wird durch das spezifische Bandoffsetverhältnis der Schichtenfolge ($\Delta E_{\text{LB}}/\Delta E_{\text{VB}}$) vorgegeben. Werte für Heterostrukturen verschiedener Materialzusammensetzungen lassen sich aus [15, 16] abschätzen, so dass die spezifischen Quantisierungseffekte der Bandanordnung erfasst werden. Im Modell kann außerdem ein statisches elektrisches Feld F in Wachstumsrichtung berücksichtigt werden, das ein zusätzliches Potential eFz verursacht und den Bandkantenverlauf entsprechend verkippt, wobei e die Elementarladung bezeichnet.

Die Bandstrukturechnung zeigt, dass sich die Energie eines Elektrons in der Quantenfilmstruktur aus den diskreten Energieeigenwerten der in Wachstumsrichtung gebundenen Zustände, die mit dem Index λ durchnummeriert werden, und dem quasikontinuierlichen Spektrum der kinetischen Energie für die Bewegung in Schichtebene zusammensetzt. Die elektronischen Eigenenergien $\varepsilon_{\lambda, \mathbf{k}}$ und die zugehörigen Eigenzustände $\Phi_{\lambda, \mathbf{k}}$ für ein bestimmtes λ werden als Subband bezeichnet. Je nach dem, welche der Basisfunktionen w_{n, \vec{k}_0} dominiert, wird das Subband cb-, hh-, lh oder so-artig bezeichnet. Die Zuordnung muss nicht für den gesamten \mathbf{k} -Bereich gelten, vielmehr kann der Charakter innerhalb eines Subbandes wechseln.

2.1.3. Dipol- und Coulomb-Matrixelemente

Mit den elektronischen Eigenzuständen des Quantenfilmsystems lassen sich schließlich die optischen Dipol- und Coulomb-Matrixelemente berechnen. Sie werden neben den Energieeigenwerten in den mikroskopischen Gleichungen, die in Kapitel 2.2, Kapitel 2.3 und Kapitel 2.4 zur Prognose optoelektronischer Eigenschaften vorgestellt werden, benötigt.

Die Oszillatorstärke eines Interbandübergangs zwischen einem Zustand im Elektronsubband λ und einem Zustand im Lochsubband ν wird durch das optische Dipolmatrixelement $d_{\mathbf{k}}^{\lambda,\nu}$ charakterisiert. Betrachtet werden ausschließlich im Impulsraum senkrecht stattfindende Übergänge. Mit der Entwicklung der Zustände $\Phi_{\lambda/\nu,\mathbf{k}}$ in die Bloch-Basisfunktionen nach Kapitel 2.1.2 ergibt sich, unter Vernachlässigung der schwachen Variation der Einhüllenden auf atomarer Skala, für das optische Dipolmatrixelement [17]

$$d_{\mathbf{k}}^{\lambda,\nu} \equiv \langle \Phi_{\lambda,\mathbf{k}} | \vec{e}_0 \cdot \hat{\vec{p}} | \Phi_{\nu,\mathbf{k}} \rangle = \sum_{n,n'} \int dz \zeta_{\lambda,\mathbf{k},n}^*(z) \zeta_{\nu,\mathbf{k},n'}(z) \vec{e}_0 \cdot \vec{p}_{n,n'}, \quad (2.5)$$

wobei jeweils über die acht Bandindizes der Basisfunktionen summiert wird. $\vec{p}_{n,n'}$ bezeichnet das Dipolmatrixelement $\langle w_{n,\vec{k}_0} | \hat{\vec{p}} | w_{n',\vec{k}_0} \rangle$ der Basisfunktionen. Dieses Matrixelement hängt nicht von der konkret vorliegenden Heterostruktur ab, vielmehr ist sein Wert materialspezifisch und kann der Literatur [13, 14, 15] entnommen werden. Gl. 2.5 bindet die Projektion dieses Matrixelements auf die Richtung der Lichtpolarisation, die durch den Einheitsvektor \vec{e}_0 ausgezeichnet wird, ein. Für den Quantenfilm werden zwei Polarisationsrichtungen unterschieden: Schwingt der elektrische Lichtfeldvektor in Quantenfilmebene, spricht man von einer transversal elektrischen (TE) Polarisation, zeigt der elektrische Lichtfeldvektor hingegen senkrecht zur Quantenfilmebene, d. h. in Wachstumsrichtung, liegt eine transversal magnetische (TM) Polarisation vor. Aufgrund der unterschiedlichen räumlichen Symmetrien der hh- und lh-Basisfunktionen, hängt die Oszillatorstärke im TE- bzw. TM-Fall vom Charakter der beteiligten Zustände ab. So koppeln Subbandzustände, die vorwiegend hh-artig sind, an TE-polarisierte Lichtfelder, während Subbandzustände mit dominierendem lh-Charakter TM-polarisierte Lichtfelder begünstigen. Da der relative Anteil der Basisfunktionen für einen elektronischen Zustand des Quantenfilms vom schichtparallelen Wellenvektor \mathbf{k} abhängt, variiert auch die Oszillatorstärke der optischen Übergänge mit dem Wellenvektor.

Die Coulomb-Wechselwirkung der Elektronen wird durch das Matrixelement [17]

$$V_{|\mathbf{k}-\mathbf{q}|}^{\lambda_1,\lambda_2,\lambda_3,\lambda_4} = \frac{e^2}{8\pi^2\epsilon_0\epsilon_H} \sum_{n,n'} \int dz dz' \frac{e^{-|\mathbf{k}-\mathbf{q}||z-z'|}}{|\mathbf{k}-\mathbf{q}|} \zeta_{\lambda_1,\mathbf{k},n}^*(z) \zeta_{\lambda_2,\mathbf{k},n'}^*(z') \zeta_{\lambda_3,\mathbf{q},n'}(z') \zeta_{\lambda_4,\mathbf{q},n}(z) \quad (2.6)$$

charakterisiert und hängt von den beteiligten Subbändern $\lambda_{1/2/3/4}$ und den schichtparallelen Wellenvektoren \mathbf{k} und \mathbf{q} ab. Die Konstante ϵ_0 ist die Permittivität und ϵ_H die dielektrische Konstante. Die Matrixelemente fließen neben den Energieeigenwerten in die Vielteilchentheorie zur Modellierung der optischen Eigenschaften von Halbleiterstrukturen ein, die im Folgenden vorgestellt wird.

2.2. Absorption und optische Verstärkung

Die Wechselwirkung von Licht und Materie wird makroskopisch durch die Maxwell-Gleichungen der Elektrodynamik beschrieben. Die resultierende Wellengleichung verknüpft das Lichtfeld mit der Polarisierung des Mediums, die die Absorptions- und Verstärkungseigenschaften bestimmen. Wie sich die optische Antwort eines Quantenfilms im Rahmen einer mikroskopischen Vielteilchentheorie unter thermischen Gleichgewichtsbedingungen berechnen lässt, wird in Kapitel 2.2.1 erläutert. Die ermittelten Spektren können in die Simulation komplexer Schichtstrukturen eingebunden werden, so dass optische Eigenschaften des Gesamtsystems unter Berücksichtigung von Resonanzeffekten quantitativ prognostiziert werden können (Kapitel 2.2.2).

2.2.1. Absorption in Quantenfilmen

Um die optische Antwort eines Quantenfilms zu ermitteln, wird die makroskopische Polarisation P in mikroskopische Polarisierungen in der Bloch-Basis entwickelt [8, 18]:

$$P = \frac{1}{\mathcal{L}} \sum_{\lambda, \nu, \mathbf{k}} \left((d_{\mathbf{k}}^{\lambda, \nu})^* p_{\lambda, \nu, \mathbf{k}} + d_{\mathbf{k}}^{\lambda, \nu} (p_{\lambda, \nu, \mathbf{k}})^* \right) \quad (2.7)$$

Dabei bezeichnet \mathcal{L} die Quantisierungslänge. Die mikroskopische Polarisation $p_{\lambda, \nu, \mathbf{k}} = \langle \hat{h}_{\nu, -\mathbf{k}} \hat{e}_{\lambda, \mathbf{k}} \rangle$ beschreibt die Interbandkohärenz zwischen einem Elektron im Subband λ und einem Loch im Subband ν beim schichtparallelen Wellenvektor \mathbf{k} bzw. $-\mathbf{k}$. Die Elektronenerzeugungs- und Vernichtungsoperatoren $\hat{e}_{\lambda, \mathbf{k}}^\dagger$ und $\hat{e}_{\lambda, \mathbf{k}}$ bzw. die Locherzeugungs- und Vernichtungsoperatoren $\hat{h}_{\nu, -\mathbf{k}}^\dagger$ und $\hat{h}_{\nu, -\mathbf{k}}$ werden im Rahmen der zweiten Quantisierung eingeführt und erfüllen die Antikommutatorrelationen für Fermionen. Gewichtet werden die einzelnen Beiträge mit dem optischen Dipolmatrixelement $d_{\mathbf{k}}^{\lambda, \nu}$ der beteiligten Zustände.

Um die zeitliche Entwicklung der mikroskopischen Polarisation zu berechnen, wird die Heisenberg-Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{O} = [\hat{O}, \hat{\mathcal{H}}] \quad (2.8)$$

ausgewertet, wobei für \hat{O} das Operatorprodukt $\hat{h}_{\nu, -\mathbf{k}} \hat{e}_{\lambda, \mathbf{k}}$ eingesetzt wird. Das Vielteilchensystem wird mit einem Hamilton-Operator

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_{\text{elek}} + \hat{\mathcal{H}}_{\text{C}} + \hat{\mathcal{H}}_{\text{D}} + \hat{\mathcal{H}}_{\text{phon}} + \hat{\mathcal{H}}_{\text{F}} \quad (2.9)$$

beschrieben [8, 18], wobei

$$\hat{\mathcal{H}}_{\text{elek}} = \sum_{\lambda_1, \mathbf{k}} \varepsilon_{\lambda_1, \mathbf{k}}^{\text{e}} \hat{e}_{\lambda_1, \mathbf{k}}^\dagger \hat{e}_{\lambda_1, \mathbf{k}} + \sum_{\nu_1, \mathbf{k}} \varepsilon_{\nu_1, \mathbf{k}}^{\text{h}} \hat{h}_{\nu_1, \mathbf{k}}^\dagger \hat{h}_{\nu_1, \mathbf{k}} \quad (2.10)$$

die kinetische Energie der Elektronen und Löcher im Ionengitter des Halbleiters,

$$\begin{aligned}\hat{\mathcal{H}}_C = & \frac{1}{2} \sum_{\substack{\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \lambda_4, \\ \mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}}} V_{\mathbf{q}}^{\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \lambda_4} \hat{e}_{\lambda_1, \mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger \hat{e}_{\lambda_2, \mathbf{k}'-\mathbf{q}}^\dagger \hat{e}_{\lambda_3, \mathbf{k}'} \hat{e}_{\lambda_4, \mathbf{k}} \\ & + \frac{1}{2} \sum_{\substack{\nu_1, \nu_2, \nu_3, \nu_4, \\ \mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}}} V_{\mathbf{q}}^{\nu_4, \nu_3, \nu_2, \nu_1} \hat{h}_{\nu_1, \mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger \hat{h}_{\nu_2, \mathbf{k}'-\mathbf{q}}^\dagger \hat{h}_{\nu_3, \mathbf{k}'} \hat{h}_{\nu_4, \mathbf{k}} \\ & - \sum_{\substack{\lambda_1, \lambda_2, \nu_1, \nu_2, \\ \mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}}} V_{\mathbf{q}}^{\lambda_1, \nu_2, \nu_1, \lambda_2} \hat{e}_{\lambda_1, \mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger \hat{h}_{\nu_1, \mathbf{k}'-\mathbf{q}}^\dagger \hat{h}_{\nu_2, \mathbf{k}'} \hat{e}_{\lambda_2, \mathbf{k}}\end{aligned}\quad (2.11)$$

die Coulomb-Wechselwirkung der Ladungsträger untereinander und

$$\hat{\mathcal{H}}_D = -E(t) \sum_{\lambda_1, \nu_1, \mathbf{k}} d_{\mathbf{k}}^{\lambda_1, \nu_1} \hat{e}_{\lambda_1, \mathbf{k}}^\dagger \hat{h}_{\nu_1, -\mathbf{k}}^\dagger + \text{h.c.} \quad (2.12)$$

die Dipolwechselwirkung mit dem klassischen Lichtfeld $E(t)$ erfasst. Die implizierten Energieeigenwerte $\varepsilon_{\lambda_1, \mathbf{k}}^e$ und $\varepsilon_{\nu_1, \mathbf{k}}^h$ der Quantenfilmstruktur und die zugehörigen Eigenzustände, die den Coulomb-Matrixelementen $V_{\mathbf{q}}^{\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \lambda_4}$ und Dipolmatrixelementen $d_{\mathbf{k}}^{\lambda_1, \nu_1}$ zugrunde liegen, werden mit Hilfe der $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Bandstrukturrechnung ermittelt (Kapitel 2.1). Die Terme

$$\hat{\mathcal{H}}_{\text{phon}} = \sum_{\mathbf{q}, q_z} \hbar \omega_{\text{LO}, \mathbf{q}, q_z} \hat{B}_{\text{LO}, \mathbf{q}, q_z}^\dagger \hat{B}_{\text{LO}, \mathbf{q}, q_z} \quad (2.13)$$

und

$$\hat{\mathcal{H}}_F = \sum_{\lambda_1, \mathbf{k}, \mathbf{q}, q_z} G_{\text{LO}, \mathbf{k}} \hat{B}_{\text{LO}, \mathbf{q}, q_z} \hat{e}_{\lambda_1, \mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger \hat{e}_{\lambda_1, \mathbf{k}} - \sum_{\nu_1, \mathbf{k}, \mathbf{q}, q_z} G_{\text{LO}, \mathbf{k}} \hat{B}_{\text{LO}, \mathbf{q}, q_z} \hat{h}_{\nu_1, \mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger \hat{h}_{\nu_1, \mathbf{k}} + \text{h.c.} \quad (2.14)$$

binden schließlich Gitterschwingungen in das Modell ein. Dabei erfüllen die Phononoperatoren $\hat{B}_{\text{LO}, \mathbf{q}, q_z}^\dagger$ bzw. $\hat{B}_{\text{LO}, \mathbf{q}, q_z}$ die Kommutatorrelationen für Bosonen und beschreiben die Emission bzw. Absorption eines Phonons der Energie $\hbar \omega_{\text{LO}, \mathbf{q}, q_z}$ bei dem Wellenvektor, der sich aus \mathbf{q} für den schichtparallelen Anteil und q_z für die senkrechte Komponente zusammensetzt. Betrachtet werden die bei Raumtemperatur dominierenden longitudinal optischen (LO) Phononen. Ihre Wechselwirkung mit dem elektronischen System wird über die so genannten Fröhlich-Matrixelemente $G_{\text{LO}, \mathbf{k}}$ bestimmt, die insbesondere von den dielektrischen Konstanten des Materials abhängen. Die Dispersion der Phononen wird vernachlässigt und für die Besetzung wird eine thermische Gleichgewichtsverteilung angenommen.

Durch die Berücksichtigung der Coulomb-Wechselwirkung mit $\hat{\mathcal{H}}_C$ in der Auswertung der Heisenberg-Gleichung erhält man für die mikroskopische Polarisierung – ein Erwartungswert von Zweieroperatoren, d. h. eine Einteilchengröße – eine Bewegungsgleichung, die an Erwartungswerte von Viereroperatoren, d. h. Zweiteilchengrößen, koppelt. Diese sind wiederum durch die Heisenberg-Gleichung bestimmt, bei deren Herleitung sich Erwartungswerte von Sechseroperatoren, d. h. Dreiteilchengrößen, ergeben und so weiter. Darüber hinaus zeigt die Auswertung des Kommutators mit $\hat{\mathcal{H}}_F$, dass zur Dynamik der mikroskopischen Polarisierung gemischte

Erwartungswerte von Elektron-, Loch- und Phononoperatoren, so genannte phononassistierte Polarisationen, beitragen, die ebenso zu einer iterativen Kopplung von Bewegungsgleichungen führen. Insgesamt bedingen die Vielteilchenwechselwirkungen also eine unendliche Hierarchie gekoppelter Differentialgleichungen. Da das Gleichungssystem erst geschlossen ist, wenn alle im System enthaltenen Teilchen einbezogen sind, ist eine exakte Lösung des Vielteilchenproblems und der damit verknüpften unendlichen Hierarchie von Gleichungen nicht zu leisten, vielmehr sind kontrollierte Näherungen und Abbruchbedigungen gefragt. In einem systematischen Ansatz, der so genannten Cluster-Entwicklung, werden N-Teilchengrößen in alle möglichen Kombinationen von Einteilchengrößen, Zweiteilchenkorrelationen, Dreiteilchenkorrelationen usw. separiert [19]. Um relevante Eigenschaften des Systems korrekt und mit tragbarem numerischen Aufwand wiederzugeben, hat sich eine Näherung zweiter Ordnung als praktikabel erwiesen. In dieser Näherung werden Viereroperatoren der Form $\langle \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_3 \hat{a}_4 \rangle$ in Kombinationen von Zweieroperatoren faktorisiert, und alle Beiträge zum vollen Viereroperatorerwartungswert, die über diese Faktorisierung hinaus gehen, werden in einem Restterm, dem Korrelationsterm, zusammengefasst:

$$\langle \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_3 \hat{a}_4 \rangle = \langle \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_3 \rangle \langle \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_4 \rangle - \langle \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_3 \rangle \langle \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_4 \rangle + \delta \langle \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_3 \hat{a}_4 \rangle \quad (2.15)$$

Um die Zweiteilchenkorrelationen $\delta \langle \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_3 \hat{a}_4 \rangle$ zu berechnen, stellt man ihre Bewegungsgleichungen auf und zerlegt die dann auftretenden Sechser- und Viereroperatoren wiederum in Zweieroperatoren (zweite Bornsche Näherung).

Auf diese Weise lassen sich die Halbleiter-Bloch-Gleichungen ableiten [8, 18]:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} p_{\lambda,\nu,\mathbf{k}} = & \sum_{\lambda_1,\nu_1} \left(e_{\lambda,\lambda_1,\mathbf{k}}^e \delta_{\nu,\nu_1} + e_{\nu,\nu_1,\mathbf{k}}^h \delta_{\lambda,\lambda_1} \right) p_{\lambda_1,\nu_1,\mathbf{k}} - \left(1 - f_{\lambda,\mathbf{k}}^e - f_{\nu,\mathbf{k}}^h \right) \hbar \Omega_{\lambda,\nu,\mathbf{k}} \\ & - i\hbar \left\{ \left(\Gamma_{\lambda,\mathbf{k}}^d + \Gamma_{\nu,\mathbf{k}}^d \right) p_{\lambda,\nu,\mathbf{k}} - \sum_{\mathbf{q}} \left(\Gamma_{\lambda,\mathbf{k},\mathbf{q}}^{\text{nd}} + \Gamma_{\nu,\mathbf{k},\mathbf{q}}^{\text{nd}} \right) p_{\lambda,\nu,\mathbf{k}+\mathbf{q}} \right\}_{\text{elek-elek}} \\ & - i\hbar \left\{ \left(\Lambda_{\lambda,\mathbf{k}}^d + \Lambda_{\nu,\mathbf{k}}^d \right) p_{\lambda,\nu,\mathbf{k}} - \sum_{\mathbf{q}} \left(\Lambda_{\lambda,\mathbf{k},\mathbf{q}}^{\text{nd}} + \Lambda_{\nu,\mathbf{k},\mathbf{q}}^{\text{nd}} \right) p_{\lambda,\nu,\mathbf{k}+\mathbf{q}} \right\}_{\text{elek-phon}} \end{aligned} \quad (2.16)$$

mit den renormierten Energien

$$\begin{aligned} e_{\lambda,\lambda_1,\mathbf{k}}^e &= \varepsilon_{\lambda,\mathbf{k}}^e \delta_{\lambda,\lambda_1} - \sum_{\lambda_2,\mathbf{q}} V_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^{\lambda,\lambda_2,\lambda_1,\lambda_2} f_{\lambda_2,\mathbf{q}}^e \\ e_{\nu,\nu_1,\mathbf{k}}^h &= \varepsilon_{\nu,\mathbf{k}}^h \delta_{\nu,\nu_1} - \sum_{\nu_2,\mathbf{q}} V_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^{\nu_1,\nu_2,\nu,\nu_2} f_{\nu_2,\mathbf{q}}^h \end{aligned} \quad (2.17)$$

und der renormierten Rabi-Frequenz des Lichtfeldes

$$\Omega_{\lambda,\nu,\mathbf{k}} = \frac{1}{\hbar} \left(d_{\mathbf{k}}^{\lambda,\nu} E(t) + \sum_{\lambda_1,\nu_1,\mathbf{q}} V_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^{\lambda,\nu_1,\nu,\lambda_1} p_{\lambda_1,\nu_1,\mathbf{q}} \right). \quad (2.18)$$

Die Coulomb-Wechselwirkung der Ladungsträger verringert also die Resonanzenergie optischer Übergänge und führt zur Exzitonenbildung. Allgemein koppelt die Bewegungsgleichung für

$p_{\lambda,\nu,\mathbf{k}}$ an die Dynamik der Ladungsträgerverteilungen $f_{\lambda,\mathbf{k}}^e = \langle \hat{e}_{\lambda,\mathbf{k}}^\dagger \hat{e}_{\lambda,\mathbf{k}} \rangle$ und $f_{\nu,\mathbf{k}}^h = \langle \hat{h}_{\nu,\mathbf{k}}^\dagger \hat{h}_{\nu,\mathbf{k}} \rangle$, aber im Quasi-Gleichgewicht können die Verteilungen durch Fermi-Funktionen beschrieben werden, die mit der Angabe der Temperatur und des chemischen Potentials festgelegt sind. Die Terme $\{\}_{\text{elek-elek}}$ und $\{\}_{\text{elek-phon}}$ in Gl. 2.16 umfassen Korrelationsbeiträge, die sich aus der Elektron-Elektron- und der Elektron-Phonon-Streuung ergeben. Sie bewirken zum einen eine Dephasierung der Polarisation und bringen zum anderen Abschirmeffekte ein. Die Beiträge werden mikroskopisch, in der zweiten Bornschen Näherung, unter Vernachlässigung von Gedächtniseffekten (Markov-Approximation) ausgewertet und beinhalten einen diagonalen Anteil, der durch die Streuraten $\Gamma_{\lambda/\nu,\mathbf{k}}^d$ und $\Lambda_{\lambda/\nu,\mathbf{k}}^d$ festgelegt ist, sowie einen nicht-diagonalen Anteil mit entsprechenden Streuraten $\Gamma_{\lambda/\nu,\mathbf{k},\mathbf{q}}^{\text{nd}}$ und $\Lambda_{\lambda/\nu,\mathbf{k},\mathbf{q}}^{\text{nd}}$. Die Streuterme sind in [20] im Einzelnen aufgeführt.

Um die lineare Antwort des Systems auf ein Lichtfeld zu berechnen, werden die Bewegungsgleichungen der mikroskopischen Polarisation für einen Testpuls $E(t)$ mit beliebig kleiner Amplitude gelöst. Je nach dem, ob der elektrische Lichtfeldvektor in Quantenfilmebene oder senkrecht dazu schwingt, werden entsprechend die Dipolmatrixelemente für den TE- oder den TM-Fall eingebunden. Die mikroskopischen Polarisationen werden dann gemäß Gl. 2.7 summiert, so dass man die makroskopische Polarisation $P(t)$ erhält, die durch eine Fourier-Transformation von der Zeitdarstellung in die Frequenzdarstellung übergeht. Der Quotient $P(\omega)/E(\omega)$ definiert schließlich die optische Suszeptibilität $\chi(\omega)$ mit realem und imaginärem Anteil.

Auf diese Weise kann die optische Antwort einer Quantenfilmschicht mit dem Hintergrundbrechungsindex n_H durch die komplexe dielektrische Funktion

$$\epsilon(\omega) = n_H^2 + 4\pi \frac{P(\omega)}{E(\omega)} \quad (2.19)$$

in Abhängigkeit der Frequenz ω angegeben werden [8, 18]. Daraus lässt sich die induzierte Brechungsindexdispersion

$$n(\omega) = \sqrt{\frac{1}{2} \left(\text{Re}\{\epsilon(\omega)\} + \sqrt{\text{Re}\{\epsilon(\omega)\}^2 + \text{Im}\{\epsilon(\omega)\}^2} \right)} \quad (2.20)$$

sowie das Absorptionsspektrum

$$\alpha(\omega) = \frac{\omega}{n_H c} \text{Im}\{\epsilon(\omega)\} \quad (2.21)$$

ableiten, wobei c die Vakuumlichtgeschwindigkeit bezeichnet. Sobald sich im System eine Besetzungsinversion einstellt, die durch den Phasenraumfüllfaktor $(1 - f_{\lambda,\mathbf{k}}^e - f_{\nu,\mathbf{k}}^h)$ in Gl. 2.16 charakterisiert wird, nimmt die Absorption negative Werte an. In dieser Situation wird ein einfallendes Lichtfeld verstärkt, und man spricht von optischem Materialgewinn.

Da die Vielteilchenkorrelationen explizit in der zweiten Born- und Markov-Näherung berechnet werden, ist die homogene Linienbreite der gewonnenen optischen Spektren kein freier Parameter, vielmehr wird die Verbreiterung durch die quantenmechanischen Streugleichungen bestimmt, in

die Temperatur- und Dichte- sowie Wellenlängenabhängigkeiten einfließen. Ein einfacherer Ansatz mit phänomenologischen Dephasierungszeiten beeinträchtigt nicht nur die Vorhersagekraft, sondern er führt auch zu unphysikalischer Absorption unterhalb der Bandkante, inkorrekten Amplituden, spektralen Positionen und Linienformen der Signaturen im Spektrum [21]. Hingegen hat sich der mikroskopische Ansatz in der realistischen Simulation optischer Eigenschaften durch Vergleiche mit Experimenten für eine Vielzahl von Materialsystemen bestätigt, siehe z. B. [22].

Die inhomogene Verbreiterung von optischen Spektren realer Halbleiterheterostrukturen wird durch kleine Variationen der chemischen Zusammensetzung und Quantenfilmbreite bestimmt, die lokale Fluktuationen der Bandlücke verursachen [23]. Um diese Wachstumsinhomogenitäten zu simulieren, wird das mikroskopisch berechnete homogen verbreiterte Spektrum, d. h. das Absorptionsspektrum bzw. die Brechungsindexdispersion, mit einer Gauß-Funktion gefaltet. Die inhomogene Verbreiterung wird durch die Halbwertsbreite der Gauß-Funktion charakterisiert, die unabhängig von Betriebsbedingungen wie Temperatur oder Ladungsträgerdichte sondern allein probenspezifisch ist.

2.2.2. Einfluss der dielektrischen Umgebung auf die Absorption

Sind die Halbleiterquantenfilme in einer Schichtstruktur eingebettet, kann sich durch den dielektrischen Hintergrund eine spezifische Resonanzstruktur ausbilden, die die Lichtfeldamplitude am Quantenfilm überhöht bzw. unterdrückt und somit auch die Stärke der Licht-Materie-Kopplung bestimmt. Um den Einfluss der dielektrischen Konfiguration auf die Quantenfilmabsorption zu berücksichtigen, wird ein Transfermatrixverfahren [24, 25] angewendet, denn mit diesem Formalismus lässt sich die Lichtpropagation auch in komplexen Schichtstrukturen, die eine Vielzahl von Grenzflächen enthalten, praktikabel beschreiben.

Die einzelnen Komponenten einer Schichtenfolge mit insgesamt m Schichten werden über ihre Breite und ihren Brechungsindex n_j erfasst. Sie geben Stufen im Brechungsindexprofil entlang der Wachstumsrichtung, die auf der z -Achse liegen soll, vor. Da ein einfallendes Lichtfeld an jeder Grenzfläche teilweise transmittiert und teilweise reflektiert wird, lässt sich die Lichtmode innerhalb einer Schicht j als eine ebene Welle mit einem hin- und einem rücklaufenden Anteil in z -Richtung charakterisieren:

$$u_{\sigma, \mathbf{q}, q_z}(z) = A_j e^{+i q_{\text{str}, j} (z - z_j)} + B_j e^{-i q_{\text{str}, j} (z - z_j)} \quad , \quad z_j < z < z_{j+1}, \\ j = 1, \dots, m, \quad (2.22)$$

wobei die Koordinate z_j die Grenzfläche zwischen der $(j - 1)$ -ten und der j -ten Schicht identifiziert. Der Parameter σ kennzeichnet die Richtung der Lichtpolarisation, die entweder senkrecht (s) oder parallel (p) zur Einfallsebene liegen kann, \mathbf{q} gibt die Projektion des Lichtfeldvektors auf die Schichtebene an, und q_z bezeichnet die z -Komponente des Vektors. Der Betrag des Lichtfeldvektors $|q| = \sqrt{\mathbf{q}^2 + q_z^2}$ und die Energie $\hbar\omega_{\mathbf{q}, q_z}$ sind über $|q| = \omega_{\mathbf{q}, q_z}/c$ verknüpft. In Gl. 2.22 fließt die Komponente des Wellenvektors für die z -Richtung unter Berücksichtigung des

Brechungsindex der Schicht ein:

$$q_{\text{str},j} = \sqrt{n_j^2 |q|^2 - \mathbf{q}^2} \quad (2.23)$$

Dabei kann \mathbf{q} aus dem Einfallswinkel abgeleitet werden, unter dem das Licht auf die Struktur fällt.

Aus der Stetigkeitsforderung für die Modenfunktion sowie für deren Ortsableitung lässt sich ein Zusammenhang zwischen den Koeffizienten benachbarter Schichten herleiten, der durch eine Übergangsmatrix beschrieben werden kann:

$$\begin{pmatrix} A_{j+1} \\ B_{j+1} \end{pmatrix} = M_j \begin{pmatrix} A_j \\ B_j \end{pmatrix} \quad (2.24)$$

In die 2×2 -Matrix M_j gehen die Schichtdicke, die Brechungsindizes n_j und n_{j+1} und die Komponenten $q_{\text{str},j}$ und $q_{\text{str},j+1}$ ein; die Matrixeinträge sind in [25] sowohl für s- als auch für p-polarisiertes Licht im Einzelnen aufgeführt. Folglich können die Koeffizienten der Modenfunktion in der j -ten Schicht iterativ aus denen am Rand berechnet werden:

$$\begin{pmatrix} A_j \\ B_j \end{pmatrix} = M_j \cdot M_{j-1} \cdot \dots \cdot M_2 \cdot M_1 \begin{pmatrix} A_0 \\ B_0 \end{pmatrix} \equiv \mathcal{M}_j \begin{pmatrix} A_0 \\ B_0 \end{pmatrix}, \quad (2.25)$$

wobei sich die Koeffizienten A_0 und B_0 auf das Medium vor der Struktur beziehen.

Mit den Matrixelementen $\mathcal{M}_{j,(\iota,\iota')}$ der Transfermatrix \mathcal{M}_j lassen sich so unter Berücksichtigung der Randbedingungen für Licht, das von der linken Seite auf eine Struktur mit insgesamt m Schichten fällt, der Transmissionskoeffizient

$$\mathcal{T}_{\sigma,\mathbf{q},q_z}^- \equiv \frac{A_m}{A_0} = \frac{\mathcal{M}_{m,(1,1)}\mathcal{M}_{m,(2,2)} - \mathcal{M}_{m,(1,2)}\mathcal{M}_{m,(2,1)}}{\mathcal{M}_{m,(2,2)}} \quad (2.26)$$

und der Reflexionskoeffizient

$$\mathcal{R}_{\sigma,\mathbf{q},q_z}^- \equiv \frac{B_0}{A_0} = -\frac{\mathcal{M}_{m,(2,1)}}{\mathcal{M}_{m,(2,2)}} \quad (2.27)$$

sowie die Koeffizienten der Modenfunktion $u_{\sigma,\mathbf{q},q_z}(z)$

$$\begin{pmatrix} A_j \\ B_j \end{pmatrix} = \mathcal{M}_j \begin{pmatrix} 1 \\ \mathcal{R}_{\sigma,\mathbf{q},q_z}^- \end{pmatrix}, \quad j = 1, \dots, m \quad (2.28)$$

bestimmen. Analog kann man entsprechende Größen $\mathcal{T}_{\sigma,\mathbf{q},q_z}^+$, $\mathcal{R}_{\sigma,\mathbf{q},q_z}^+$ und $u_{\sigma,-\mathbf{q},q_z}(z)$ für Licht, das von der rechten Seite auf die Struktur fällt, herleiten.

Um die optische Antwort der Quantenfilme auf das Lichtfeld in die Transfermatrix einzubinden, wird die Absorption und die induzierte Brechungsindexänderung zum Hintergrundbrechungsindex der eingebetteten Quantenfilmschichten addiert. Entsprechend führt man für diese Schichten

$$q_{\text{str},j,\text{qw}} = \sqrt{\left(\sqrt{n_{\text{H}}^2 + \text{Re}\{\epsilon(\omega_{\mathbf{q},q_z})\}} + i \frac{\text{Im}\{\epsilon(\omega_{\mathbf{q},q_z})\}}{n_{\text{H}}}\right)^2 |q|^2 - \mathbf{q}^2} \quad (2.29)$$

ein, wobei die dielektrische Funktion $\epsilon(\omega_{\mathbf{q},q_z})$ mit Hilfe der Halbleiter-Bloch-Gleichungen berechnet wird (Kapitel 2.2.1). Für s-polarisiertes Licht kann man sich auf die Ergebnisse im TE-Fall beschränken, da der elektrische Lichtfeldvektor in dieser Situation senkrecht zur Quantenfilmebene schwingt. Bei p-polarisiertem Licht wird der elektrische Lichtfeldvektor in eine zum Quantenfilm parallele und eine zum Quantenfilm senkrechte Komponente zerlegt, deren Verhältnis durch den Einfallswinkel festgelegt ist. Dementsprechend muss die optische Antwort für den TE- und den TM-Fall gewichtet werden; nur bei senkrechtem Einfall verschwindet der TM-Beitrag, so dass p- und s-Polarisation äquivalent werden.

Mit der Einführung der komplexen Brechungsindizes für die Quantenfilmschichten kann schließlich die Lichtintensität $I_{\sigma,\mathbf{q},q_z}^-$, die im System insgesamt absorbiert wird, ermittelt werden:

$$I_{\sigma,\mathbf{q},q_z}^- = 1 - |\mathcal{R}_{\sigma,\mathbf{q},q_z}^-|^2 - \frac{q_{\text{str},m}}{q_{\text{str},0}} |\mathcal{T}_{\sigma,\mathbf{q},q_z}^-|^2 \quad (2.30)$$

Auf der Basis dieses Modells gelingt es insbesondere, die Normalmodenaufspaltung [26], die bei Systemen starker Licht-Materie-Kopplung auftritt, zu simulieren.

2.3. Lumineszenz

Die Lumineszenz einer optisch angeregten Halbleiterstruktur wird durch den spontanen Übergang eines Elektrons aus einem angeregten Zustand in einen energetisch tiefer liegenden Zustand unter Emission eines Photons verursacht. Im Folgenden wird die mikroskopische Beschreibung dieser Prozesse skizziert (Kapitel 2.3.1). Darauf aufbauend wird in Kapitel 2.3.2 eine Filterfunktion vorgestellt, mit der der Einfluss einer dielektrischen Umgebung auf die Lumineszenz eines isolierten Quantenfilms erfasst werden kann.

2.3.1. Spontane Emission in Quantenfilmen

Um den Vorgang der spontanen Emission beschreiben zu können, muss das Lichtfeld quantisiert werden, was Photonoperatoren $\hat{b}_{\sigma,\mathbf{q},q_z}^\dagger$ bzw. $\hat{b}_{\sigma,\mathbf{q},q_z}$ in die Theorie einbindet. Sie erfüllen die Kommutatorrelationen für Bosonen [18] und erzeugen bzw. vernichten ein Photon in der Lichtmode, die durch die Lichtpolarisation σ und einen dreidimensionalen Wellenvektor charakterisiert wird. Der schichtparallele Anteil des Wellenvektors wird durch \mathbf{q} erfasst; q_z soll die Komponente senkrecht zur Quantenfilmebene bezeichnen.

Das Lumineszenzspektrum $S_\sigma(\omega_{\mathbf{q},q_z})$ ist durch die zeitliche Ableitung des inkohärenten Anteils der Photonendichte $\Delta\langle\hat{b}_{\sigma,\mathbf{q},q_z}^\dagger\hat{b}_{\sigma,\mathbf{q},q_z}\rangle$ für spezifische Photonenergien $\hbar\omega_{\mathbf{q},q_z}$ bestimmt [25]:

$$S_\sigma(\omega_{\mathbf{q},q_z}) = \frac{\partial}{\partial t} \Delta\langle\hat{b}_{\sigma,\mathbf{q},q_z}^\dagger\hat{b}_{\sigma,\mathbf{q},q_z}\rangle. \quad (2.31)$$

In der Beschreibung kann man sich dabei auf die inkohärenten Korrelationen beschränken, da kohärente Größen wie die Polarisierung und das klassische Lichtfeld typischerweise innerhalb weniger Pikosekunden nach der optischen Anregung dephasieren, während die charakteristische Zeitskala der Rekombinationsprozesse im Nanosekundenbereich liegt.

Um den Ausdruck in Gl. 2.31 zu berechnen, werden Bewegungsgleichungen für die mikroskopischen Größen aufgestellt; detaillierte Darstellungen finden sich in [25, 27, 28]. Im ersten Schritt wird die Heisenberg-Gleichung (Gl. 2.8) für das Photonoperatorprodukt $\hat{b}_{\sigma,\mathbf{q},q_z}^\dagger\hat{b}_{\sigma,\mathbf{q},q_z}$ ausgewertet. Dabei muss im Hamilton-Operator des Systems der Term für die Licht-Materie-Wechselwirkung anders als bei der semiklassischen Behandlung ($\hat{\mathcal{H}}_D$, Gl. 2.12) durch

$$\hat{\mathcal{H}}_{\text{phot}} = \sum_{\sigma,\mathbf{q},q_z} \hbar\omega_{\mathbf{q},q_z} \left(\hat{b}_{\sigma,\mathbf{q},q_z}^\dagger \hat{b}_{\sigma,\mathbf{q},q_z} + \frac{1}{2} \right) \quad (2.32)$$

und

$$\hat{\mathcal{H}}_D = - \sum_{\substack{\sigma,\mathbf{q},q_z; \\ \lambda_1,\nu_1,\mathbf{k}}} i \mathcal{E}_{\mathbf{q},q_z} u_{\sigma,\mathbf{q},q_z} d_{\mathbf{k}}^{\lambda_1,\nu_1} \hat{b}_{\sigma,\mathbf{q},q_z} \hat{h}_{\nu_1,\mathbf{q}-\mathbf{k}}^\dagger \hat{e}_{\lambda_1,\mathbf{k}}^\dagger + \text{h.c.} \quad (2.33)$$

ersetzt werden, wobei $\hat{\mathcal{H}}_{\text{phot}}$ den Beitrag der freien Photonen und $\hat{\mathcal{H}}_D$ die Dipolwechselwirkung des quantisierten Lichtfeldes mit dem elektronischen System berücksichtigt. Die Größe $\mathcal{E}_{\mathbf{q},q_z} = \sqrt{\hbar\omega_{\mathbf{q},q_z}/2\epsilon_0}$ bezeichnet die Vakuumfeldamplitude und $u_{\sigma,\mathbf{q},q_z}$ gibt die Stärke der Lichtmode an der Quantenfilmposition an. Mit dem modifizierten Hamilton-Operator des Vielteilchensystems

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_{\text{elek}} + \hat{\mathcal{H}}_C + \hat{\mathcal{H}}_{\text{phot}} + \hat{\mathcal{H}}_D + \hat{\mathcal{H}}_{\text{phon}} + \hat{\mathcal{H}}_F \quad (2.34)$$

ergibt sich bei Vernachlässigung nicht-resonanter Beiträge

$$\frac{\partial}{\partial t} \Delta\langle\hat{b}_{\sigma,\mathbf{q},q_z}^\dagger\hat{b}_{\sigma,\mathbf{q},q_z}\rangle = \frac{2}{\hbar\mathcal{L}} \text{Re} \left\{ \sum_{\lambda,\nu,\mathbf{k}} (\mathcal{Q}_{\sigma,\mathbf{q},q_z,\mathbf{k}}^{\lambda,\nu})^* \Delta\langle\hat{b}_{\sigma,\mathbf{q},q_z}^\dagger\hat{h}_{\nu,\mathbf{q}-\mathbf{k}}\hat{e}_{\lambda,\mathbf{k}}\rangle \right\}, \quad (2.35)$$

wobei das effektive Dipolmatrixelement $\mathcal{Q}_{\sigma,\mathbf{q},q_z,\mathbf{k}}^{\lambda,\nu} \equiv \mathcal{F}_{\sigma,\mathbf{q},q_z} d_{\mathbf{k}}^{\lambda,\nu}$ mit $\mathcal{F}_{\sigma,\mathbf{q},q_z} \equiv \mathcal{E}_{\mathbf{q},q_z} u_{\sigma,\mathbf{q},q_z}$ die Stärke der Licht-Materie-Kopplung charakterisiert.

Zentral für die Berechnung der Lumineszenz sind die photonassistierten Polarisierungen $\Delta\langle\hat{b}_{\sigma,\mathbf{q},q_z}^\dagger\hat{h}_{\nu,\mathbf{q}-\mathbf{k}}\hat{e}_{\lambda,\mathbf{k}}\rangle$, die die Rekombination eines Elektron-Loch-Paares unter gleichzeitiger Emission eines Photons beschreiben. Die Dynamik dieser Größen lässt sich wiederum mit Hilfe der Heisenberg-Gleichung (Gl. 2.8) bestimmen, was zu den Halbleiter-Lumineszenz-

Gleichungen führt:

$$\begin{aligned}
 & \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \varepsilon_{\nu, \mathbf{k}-\mathbf{q}}^h - \varepsilon_{\lambda, \mathbf{k}}^e + \hbar\omega_{\mathbf{q}, q_z} \right) \Delta \langle \hat{b}_{\sigma, \mathbf{q}, q_z}^\dagger \hat{h}_{\nu, \mathbf{q}-\mathbf{k}} \hat{e}_{\lambda, \mathbf{k}} \rangle \\
 &= - \left\{ \sum_{\lambda_1} \Delta \langle \hat{b}_{\sigma, \mathbf{q}, q_z}^\dagger \hat{h}_{\nu, \mathbf{q}-\mathbf{k}} \hat{e}_{\lambda_1, \mathbf{k}} \rangle \sum_{\lambda_2, \mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'}^{\lambda, \lambda_2, \lambda_1, \lambda_2} f_{\lambda_2, \mathbf{k}'}^e \right. \\
 &\quad \left. - \sum_{\nu_1} \Delta \langle \hat{b}_{\sigma, \mathbf{q}, q_z}^\dagger \hat{h}_{\nu_1, \mathbf{q}-\mathbf{k}} \hat{e}_{\lambda, \mathbf{k}} \rangle \sum_{\nu_2, \mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}-\mathbf{q}-\mathbf{k}'}^{\nu_2, \nu_1, \nu_2, \nu} f_{\nu_2, \mathbf{k}'}^h \right\}_1 \\
 &\quad - \left\{ \left(1 - f_{\lambda, \mathbf{k}}^e - f_{\nu, \mathbf{k}-\mathbf{q}}^h \right) \sum_{\lambda_1, \nu_1, \mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'}^{\lambda, \nu_1, \nu, \lambda_1} \Delta \langle \hat{b}_{\sigma, \mathbf{q}, q_z}^\dagger \hat{h}_{\nu_1, \mathbf{q}-\mathbf{k}'} \hat{e}_{\lambda_1, \mathbf{k}'} \rangle \right\}_2 \\
 &\quad + \left\{ \frac{\partial}{\partial t} \Delta \langle \hat{b}_{\sigma, \mathbf{q}, q_z}^\dagger \hat{h}_{\nu, \mathbf{q}-\mathbf{k}} \hat{e}_{\lambda, \mathbf{k}} \rangle \right\}_{\text{kor}}_3 \\
 &\quad - \left\{ \left(1 - f_{\lambda, \mathbf{k}}^e - f_{\nu, \mathbf{k}-\mathbf{q}}^h \right) \sum_{\mathbf{q}', q'_z} i \mathcal{Q}_{\sigma, \mathbf{q}', q'_z, \mathbf{k}}^{\lambda, \nu} \Delta \langle \hat{b}_{\sigma, \mathbf{q}, q_z}^\dagger \hat{b}_{\sigma, \mathbf{q}', q'_z} \rangle \right\}_4 \\
 &\quad - \left\{ \mathcal{Q}_{\sigma, \mathbf{q}, q_z, \mathbf{k}}^{\lambda, \nu} f_{\lambda, \mathbf{k}}^e f_{\nu, \mathbf{k}-\mathbf{q}}^h + \sum_{\lambda_1, \nu_1, \mathbf{k}'} \mathcal{Q}_{\sigma, \mathbf{q}, q_z, \mathbf{k}'}^{\lambda_1, \nu_1} \Delta \langle \hat{e}_{\lambda_1, \mathbf{k}'}^\dagger \hat{h}_{\nu_1, \mathbf{q}-\mathbf{k}'}^\dagger \hat{h}_{\nu, \mathbf{q}-\mathbf{k}} \hat{e}_{\lambda, \mathbf{k}} \rangle \right\}_5. \quad (2.36)
 \end{aligned}$$

Die Form der Gleichung ähnelt der Bewegungsgleichung für die mikroskopische Polarisation (Gl. 2.16). Die Terme in $\{\}_1$ enthalten die charakteristische Bandlückenrenormierung aufgrund der Coulomb-Wechselwirkung der Ladungsträger. Außerdem tritt in $\{\}_2$ der Phasenraumfüllfaktor mit einer verallgemeinerten photonassistierten Rabi-Frequenz auf. Für die eingehenden Ladungsträgerbesetzungen $f_{\lambda, \mathbf{k}}^e$ und $f_{\nu, \mathbf{k}}^h$ werden Fermi-Verteilungen angenommen, die sich im Quasi-Gleichgewicht einstellen. Die höheren Korrelationsterme $\{\}_3$ durch Elektron-Elektron- und Elektron-Phonon-Streuprozesse werden analog zur Dynamik der mikroskopischen Polarisation (Kapitel 2.2.1) in der zweiten Born- und Markov-Näherung berechnet. Der stimulierte Beitrag $\{\}_4$ bezieht die Kopplung von Lichtmoden ein, kann in Systemen ohne ausgeprägte Resonatorstruktur aber vernachlässigt werden.

Die Quellterme für die Lumineszenz sind in $\{\}_5$ erfasst. Sobald im System Ladungsträger injiziert werden, bauen sich mit $f_{\lambda, \mathbf{k}}^e f_{\nu, \mathbf{k}}^h$ photonassistierte Polarisationen auf. Da der Summand mit dem effektiven Dipolmatrixelement $\mathcal{Q}_{\sigma, \mathbf{q}, q_z, \mathbf{k}}^{\lambda, \nu}$ gewichtet wird, ergeben sich hohe Beiträge, wenn der beteiligte Interbandübergang eine große Oszillatorstärke aufweist und die Modenstärke am Quantenfilm nicht verschwindet. Zudem verursachen exzitronische Korrelationen $\Delta \langle \hat{e}_{\lambda_1, \mathbf{k}'}^\dagger \hat{h}_{\nu_1, \mathbf{q}-\mathbf{k}'}^\dagger \hat{h}_{\nu, \mathbf{q}-\mathbf{k}} \hat{e}_{\lambda, \mathbf{k}} \rangle$ einen Beitrag zur Lumineszenz. Um den Anteil der exzitronischen Korrelationen zu bestimmen, werden auch für diese Größen Bewegungsgleichungen aufgestellt. Die resultierenden Gleichungen sind in [29] aufgeführt. Da eine Vernachlässigung der exzitronischen Korrelationen zu einer Unterschätzung der Lumineszenzamplituden bis zu einem Faktor von zwei führen kann [30], wird das System von Differentialgleichungen erst nach ihrer Einbindung geschlossen.

Auf dieser Basis lässt sich schließlich das Lumineszenzspektrum eines Quantenfilmsystems prognostizieren. Um Unordnungserscheinungen realer Halbleiterheterostrukturen zu berücksichtigen, wird das Lumineszenzspektrum genau wie ein Absorptionsspektrum durch die Faltung mit

einer Gauß-Funktion inhomogen verbreitert.

2.3.2. Einfluss der dielektrischen Umgebung auf die spontane Emission

Die Emissionseigenschaften eines Quantenfilms können durch den dielektrischen Hintergrund in einer Laserstruktur verändert werden [31, 32]. Die spezifischen Resonanzen des Systems führen je nach Wellenlänge zu einer Überhöhung bzw. Unterdrückung der Lumineszenz, die an der Oberfläche, senkrecht zu den Schichten der Struktur, detektiert wird.

Formal wird die dielektrische Umgebung in den Halbleiter-Lumineszenz-Gleichungen über die spezifische Modenstärke am Quantenfilm berücksichtigt. Die Modenstärke geht mit $\mathcal{F}_{\sigma,\mathbf{q},q_z}$ in das effektive Dipolmatrixelement $\mathcal{Q}_{\sigma,\mathbf{q},q_z,\mathbf{k}}^{\lambda,\nu}$ ein und wirkt sich damit auf die Kopplung zwischen den photonassistierten Polarisationen und der Photonendichte (Gl. 2.35) sowie auf den stimulierten Beitrag und den Quellterm (Gl. 2.36, $\{\}_4$ und $\{\}_5$) aus.

Um den Einfluss der dielektrischen Umgebung von der Lösung der Halbleiter-Lumineszenz-Gleichungen zu trennen, wird die Transformation

$$\hat{b}_{\sigma,\mathbf{q},q_z}^\dagger = \mathcal{F}_{\sigma,\mathbf{q},q_z} \hat{\tilde{b}}_{\sigma,\mathbf{q},q_z}^\dagger \quad (2.37)$$

eingeführt [33]. Damit transformieren sich Gl. 2.35 und Gl. 2.36 für die Größen $\Delta\langle\hat{\tilde{b}}_{\sigma,\mathbf{q},q_z}^\dagger \hat{\tilde{b}}_{\sigma,\mathbf{q},q_z}\rangle$ und $\Delta\langle\hat{\tilde{b}}_{\sigma,\mathbf{q},q_z}^\dagger \hat{h}_{\nu,\mathbf{q}-\mathbf{k}} \hat{e}_{\lambda,\mathbf{k}}\rangle$ so, dass die Modenstärke im stimulierten Term isoliert auftritt. Davon abgesehen verändert sich die Form der Halbleiter-Lumineszenz-Gleichungen nicht.

Mit dem Detektoroperator [25]

$$\hat{D}_{\sigma,\mathbf{q},q_z} = \mathcal{R}_{\sigma,\mathbf{q},q_z}^- \hat{b}_{\sigma,\mathbf{q},q_z} + \sqrt{\frac{q_{\text{str},0}}{q_{\text{str},m}}} \mathcal{T}_{\sigma,\mathbf{q},q_z}^+ \hat{b}_{\sigma,-\mathbf{q},q_z}, \quad (2.38)$$

der den reflektierten Anteil der hinlaufenden und den transmittierten Anteil der rücklaufenden Mode beschreibt, lässt sich die Lumineszenz $S_\sigma^D(\omega_{\mathbf{q},q_z})$, die an der Oberfläche der Struktur aus m Schichten zu erwarten ist, bei Vernachlässigung des stimulierten Beitrags schreiben als [33]

$$S_\sigma^D(\omega_{\mathbf{q},q_z}) \equiv \langle \hat{D}_{\sigma,\mathbf{q},q_z}^\dagger \hat{D}_{\sigma,\mathbf{q},q_z} \rangle = F_{\sigma,\mathbf{q},q_z}^{\text{Filter}} \Delta\langle \hat{\tilde{b}}_{\sigma,\mathbf{q},q_z}^\dagger \hat{\tilde{b}}_{\sigma,\mathbf{q},q_z} \rangle \quad (2.39)$$

mit der Filterfunktion

$$\begin{aligned} F_{\sigma,\mathbf{q},q_z}^{\text{Filter}} &= |\mathcal{R}_{\sigma,\mathbf{q},q_z}^-|^2 |\mathcal{F}_{\sigma,\mathbf{q},q_z}|^2 + \frac{q_{\text{str},0}}{q_{\text{str},m}} |\mathcal{T}_{\sigma,\mathbf{q},q_z}^+|^2 |\mathcal{F}_{\sigma,-\mathbf{q},q_z}|^2 \\ &+ \sqrt{\frac{q_{\text{str},0}}{q_{\text{str},m}}} (\mathcal{R}_{\sigma,\mathbf{q},q_z}^-)^* \mathcal{T}_{\sigma,\mathbf{q},q_z}^+ \mathcal{F}_{\sigma,\mathbf{q},q_z} (\mathcal{F}_{\sigma,-\mathbf{q},q_z})^* \\ &+ \sqrt{\frac{q_{\text{str},0}}{q_{\text{str},m}}} \mathcal{R}_{\sigma,\mathbf{q},q_z}^- (\mathcal{T}_{\sigma,\mathbf{q},q_z}^+)^* (\mathcal{F}_{\sigma,\mathbf{q},q_z})^* \mathcal{F}_{\sigma,-\mathbf{q},q_z}. \end{aligned} \quad (2.40)$$

Der eingehende Reflexionskoeffizient $\mathcal{R}_{\sigma,\mathbf{q},q_z}^-$, der Transmissionskoeffizient $\mathcal{T}_{\sigma,\mathbf{q},q_z}^+$ und die Modenfunktionen $u_{\sigma,\mathbf{q},q_z}(z)$ und $u_{\sigma,-\mathbf{q},q_z}(z)$, die mit ihrer Modenstärke an der Quantenfilmposition die Größen $\mathcal{F}_{\sigma,\mathbf{q},q_z}$ und $\mathcal{F}_{\sigma,-\mathbf{q},q_z}$ festlegen, können für die vorgegebene Photonenergie $\hbar\omega_{\mathbf{q},q_z}$ und Lichtpolarisation σ mit Hilfe der Transfermatrixmethode bestimmt werden (Kapitel 2.2.2).

Das Emissionsspektrum einer Halbleiterschichtstruktur lässt sich also berechnen, indem man die Filterfunktion $F_{\sigma,\mathbf{q},q_z}^{\text{Filter}}$ für die vorliegende dielektrische Struktur auswertet und mit der Lumineszenz des isolierten Quantenfilms $\Delta\langle\hat{b}_{\sigma,\mathbf{q},q_z}^\dagger\hat{b}_{\sigma,\mathbf{q},q_z}\rangle$ multipliziert. Zwar gilt die Formel nur im Regime schwacher Licht-Materie-Kopplung, in dem der stimulierte Beitrag keine Rolle spielt, aber für diesen Fall stellt die Methode ein praktikables Verfahren zur Analyse der Emissionseigenschaften dar, denn bei einer Modifikation der dielektrischen Umgebung des Quantenfilms müssen nicht die numerisch aufwändigen Halbleiter-Lumineszenz-Gleichungen erneut gelöst werden, sondern es muss allein die Filterfunktion entsprechend angepasst werden, in der die Information über die dielektrische Konfiguration erfasst ist.

Enthält die Struktur mehrere Quantenfilme, wird zunächst die Filterfunktion für jeden einzelnen Quantenfilm bestimmt. Die Filterfunktion des Gesamtsystems ergibt sich dann, indem man die Filterfunktion der einzelnen Quantenfilme mittelt, vorausgesetzt, dass Kopplungseffekte der Quantenfilme untereinander vernachlässigt werden können.

2.4. Ladungsträgerverluste

In Halbleiterlasersystemen können angeregte Ladungsträger durch verschiedene Mechanismen verloren gehen. Zu den fundamentalen Rekombinationsprozessen ohne stimulierte Emission eines Photons gehören die Rekombination an Defekten, die spontane Emission und die Auger-Rekombination. Die Bedeutsamkeit der einzelnen Ladungsträgerverlustmechanismen hängt vom spezifischen Materialsystem und Betriebsbedingungen wie Temperatur und Ladungsträgerdichte ab. Da die defektassistierte Rekombination in qualitativ hochwertigen Probenstrukturen meist nur eine untergeordnete Rolle spielt, stehen die Verluste durch spontane Emission (Kapitel 2.4.1) und Auger-Rekombination (Kapitel 2.4.2) im Zentrum, die sich im Rahmen der mikroskopischen Vielteilchentheorie beschreiben lassen.

2.4.1. Strahlende Verluste

Um die Ladungsträgerverluste durch spontane Emission zu ermitteln, werden zunächst die Lumineszenzspektren des vorliegenden Quantenfilms bei einer bestimmten Temperatur und Ladungsträgerdichte sowohl für den Fall einer TE- als auch für den Fall einer TM-Polarisation mit Hilfe der Halbleiter-Lumineszenz-Gleichungen (Kapitel 2.3.1) berechnet. Durch eine Integration des Lumineszenzspektrums $S_{\text{TE/TM}}(\omega)$ erhält man schließlich die zugehörige Ladungsträgerverlustrate

$$r_{\text{SE,TE/TM}} = \frac{1}{N} \int d\omega S_{\text{TE/TM}}(\omega), \quad (2.41)$$

wobei N die zweidimensionale Ladungsträgerdichte bezeichnet. Da die Lumineszenz in alle Richtungen emittiert wird, und Propagations- und Polarisationsrichtung dem Zufall unterliegen, ergibt sich für die Ladungsträgerverlustrate insgesamt:

$$r_{\text{SE}} = \frac{2}{3} r_{\text{SE,TE}} + \frac{1}{3} r_{\text{SE,TM}}. \quad (2.42)$$

Damit verknüpft ist die Lebensdauer

$$\tau_{\text{SE}} = 1/r_{\text{SE}} \quad (2.43)$$

und die Verluststromdichte

$$J_{\text{SE}} = e N r_{\text{SE}}. \quad (2.44)$$

2.4.2. Auger-Verluste

So genannte Auger-Verluste werden durch nicht-strahlende Rekombinationsmechanismen im Halbleitersystem verursacht. Bei diesen Prozessen wird die freiwerdende Energie einer Elektron-Loch-Rekombination nicht zur Erzeugung eines Photons genutzt, sondern auf einen weiteren Ladungsträger übertragen, der in einen entsprechend höherenergetischen Zustand gestreut wird.

Die resultierende Ladungsträgerverlustrate r_{Auger} lässt sich aus der zeitlichen Änderung der Ladungsträgerbesetzung in den Elektron- bzw. Lochsubbändern berechnen:

$$r_{\text{Auger}} = \frac{1}{N} \sum_{\lambda/\nu, \mathbf{k}} \frac{d}{dt} f_{\lambda/\nu, \mathbf{k}}^{\text{e/h}}, \quad (2.45)$$

wobei die Elektronsubbänder mit dem Index λ und die Lochsubbänder mit dem Index ν nummeriert werden. Unabhängig davon, ob man zur Auswertung die Elektron- oder die Lochsubbänder betrachtet, werden sich für die beiden Fälle identische Auger-Raten ergeben, da bei einem Auger-Prozess sowohl ein Elektron als auch ein Loch verloren gehen.

Um die Dynamik der Ladungsträgerverteilung in den Elektron- und Lochsubbändern $f_{\lambda, \mathbf{k}}^{\text{e}} = \langle \hat{e}_{\lambda, \mathbf{k}}^\dagger \hat{e}_{\lambda, \mathbf{k}} \rangle$ bzw. $f_{\nu, \mathbf{k}}^{\text{h}} = \langle \hat{h}_{\nu, \mathbf{k}}^\dagger \hat{h}_{\nu, \mathbf{k}} \rangle$ zu ermitteln, werden Streugleichungen aufgestellt [34]. Dazu wird für die jeweilige Größe die Heisenberg-Gleichung (Gl. 2.8) ausgewertet, indem das Elektron- bzw. Lochoperatorprodukt mit dem Hamilton-Operator

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_{\text{elek}} + \hat{\mathcal{H}}_{\text{V}} \quad (2.46)$$

kommutiert wird. Die Beschreibung rechnet die kinetische Energie der Ladungsträger ($\hat{\mathcal{H}}_{\text{elek}}$, Gl. 2.10) und die relevanten Coulomb-Wechselwirkungsterme ($\hat{\mathcal{H}}_{\text{V}}$) ein, die die Anzahl der La-

ungsträger eines Subbandes verändern. Diese sind gegeben durch

$$\begin{aligned}
 \hat{\mathcal{H}}_V = & 2 \sum_{\substack{\lambda_1, \nu_1, \nu_2, \nu_3, \\ \mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}}} \left(\tilde{V}_{\mathbf{q}}^{\lambda_1, \nu_3, \nu_1, \nu_2} \hat{e}_{\lambda_1, \mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger \hat{h}_{\nu_1, \mathbf{k}'-\mathbf{q}}^\dagger \hat{h}_{\nu_2, -\mathbf{k}}^\dagger \hat{h}_{\nu_3, \mathbf{k}'} \right. \\
 & \left. + \tilde{V}_{\mathbf{q}}^{\nu_2, \nu_1, \nu_3, \lambda_1} \hat{h}_{\nu_3, \mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger \hat{h}_{\nu_2, -\mathbf{k}'+\mathbf{q}} \hat{h}_{\nu_1, \mathbf{k}} \hat{e}_{\lambda_1, \mathbf{k}'} \right) \\
 - & 2 \sum_{\substack{\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \nu_1, \\ \mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}}} \left(\tilde{V}_{\mathbf{q}}^{\nu_1, \lambda_1, \lambda_2, \lambda_3} \hat{e}_{\lambda_1, \mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger \hat{h}_{\nu_1, -\mathbf{k}'+\mathbf{q}} \hat{e}_{\lambda_2, \mathbf{k}} \hat{e}_{\lambda_3, \mathbf{k}'} \right. \\
 & \left. + \tilde{V}_{\mathbf{q}}^{\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \nu_1} \hat{e}_{\lambda_1, \mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger \hat{e}_{\lambda_2, \mathbf{k}'-\mathbf{q}}^\dagger \hat{h}_{\nu_1, -\mathbf{k}}^\dagger \hat{e}_{\lambda_3, \mathbf{k}'} \right). \quad (2.47)
 \end{aligned}$$

Während der erste und der vierte Term die Erzeugung eines Elektron-Loch-Paars durch den Übergang eines angeregten Ladungsträgers in einen niederenergetischeren Zustand, also eine Stoßionisation (engl.: *impact ionisation*), beschreiben, erfassen der zweite und der dritte Term die eigentlichen Auger-Prozesse, die durch die Vernichtung eines Elektron-Loch-Paars charakterisiert sind. Die Abschirmung von Ladungsträgern wird durch die Verwendung von abgeschwächten Coulomb-Matrixelementen $\tilde{V}_{\mathbf{q}}^{\lambda_1, \nu_3, \nu_1, \nu_2} = V_{\mathbf{q}}^{\lambda_1, \nu_3, \nu_1, \nu_2} / \epsilon_{\mathbf{q}}$ eingebracht, wobei die dielektrische Funktion $\epsilon_{\mathbf{q}}$ mit der statischen Lindhard-Formel [8] ermittelt wird. Die Coulomb-Wechselwirkung führt in der Herleitung der Bewegungsgleichungen zum Hierarchieproblem, das wie bei den Halbleiter-Bloch- und Halbleiter-Lumineszenz-Gleichungen (Kapitel 2.2.1 und Kapitel 2.3.1) in der zweiten Born- und Markov-Näherung gelöst wird.

Auf diese Weise lässt sich für die Besetzung eines Zustands im Elektronsubband λ zeigen:

$$\begin{aligned}
 \frac{d}{dt} f_{\lambda, \mathbf{k}}^e = & \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}', \mathbf{q}} \text{Re} \left(\left\{ \sum_{\nu_1, \nu_2, \nu_3} \left(|\tilde{V}_{\mathbf{q}}^{\lambda, \nu_3, \nu_1, \nu_2}|^2 - \tilde{V}_{\mathbf{q}}^{\lambda, \nu_3, \nu_1, \nu_2} \tilde{V}_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}+\mathbf{k}}^{\nu_1, \nu_2, \nu_3, \lambda} \right) \right. \right. \\
 & \mathcal{D}(-\varepsilon_{\lambda, \mathbf{k}}^e - \varepsilon_{\nu_1, \mathbf{k}'-\mathbf{q}}^h - \varepsilon_{\nu_2, \mathbf{q}-\mathbf{k}}^e + \varepsilon_{\nu_3, \mathbf{k}'}^h) \\
 & \left(f_{\nu_3, \mathbf{k}'}^h (1 - f_{\nu_2, \mathbf{q}-\mathbf{k}}^h) (1 - f_{\nu_1, \mathbf{k}'-\mathbf{q}}^h) (1 - f_{\lambda, \mathbf{k}}^e) \right. \\
 & \left. \left. - (1 - f_{\nu_3, \mathbf{k}'}^h) f_{\nu_2, \mathbf{q}-\mathbf{k}}^h f_{\nu_1, \mathbf{k}'-\mathbf{q}}^h f_{\lambda, \mathbf{k}}^e \right) \right\}_a \\
 & + \left\{ \dots \right\}_b + \left\{ \dots \right\}_c + \left\{ \dots \right\}_d \Big). \quad (2.48)
 \end{aligned}$$

Der zu $f_1 f_2 f_3 (1 - f_4)$ proportionale Term in $\{\}_a$ gibt wieder, wie ein Elektron aus Subband λ mit einem Loch aus Subband ν_2 rekombiniert und wie die Energie zur Anregung eines Lochs aus Subband ν_1 in Subband ν_3 genutzt wird. Dabei stellt die verbreiterte Delta-Funktion \mathcal{D} die Energieerhaltung sicher. Für die Ladungsträgerverteilungen werden Fermi-Funktionen eingesetzt, die sich im Quasi-Gleichgewicht einstellen, wenn man die Ladungsträgerdichte im System aufrecht erhält. Gewichtet wird der Term mit einem Faktor, der durch die Stärke der zugehörigen Coulomb-Matrixelemente bestimmt ist und sich in einen direkten und einen Austauschbeitrag gliedert. Lässt man den Austauschbeitrag unbeachtet, so nimmt der Ausdruck gerade die Form von Fermis Goldener Regel an, die für die Beschreibung der Auger-Rekombination üblich ist [35]. Der umgekehrte Prozess der Ionisation wird durch den zu $(1 - f_1)(1 - f_2)(1 - f_3)f_4$

proportionalen Term erfasst. Sein Beitrag kann in den Systemen, die im Rahmen dieser Arbeit untersucht werden, aber vernachlässigt werden, da die Bandlücke typischerweise so groß ist, dass sich praktisch kein Ladungsträger mit ausreichend großer Selbstenergie findet. Die weiteren Summanden $\{\}_b$, $\{\}_c$ und $\{\}_d$ haben die Form von $\{\}_a$ und beschreiben, wie ein Elektron aus Subband λ mit einem Loch rekombiniert, um ein weiteres Elektron anzuregen (b), wie ein Elektron aus Subband λ durch die freiwerdende Energie einer Elektron-Loch-Rekombination angeregt wird (c), und wie ein Elektron bei einem Auger-Prozess in das Subband λ gestreut wird (d). In [34] sind die Summanden im Einzelnen angegeben.

Es hat sich gezeigt, dass der Beitrag der Austauschsterme zur Auger-Rate im Vergleich zu den direkten Termen gering ist [34] und somit zur Vereinfachung der Numerik vernachlässigt werden kann. Entscheidend ist vielmehr, die Coulomb-Matrixelemente, die in den Streugleichungen auftreten, explizit zu berechnen und dabei insbesondere die Band- und k -Abhängigkeit der eingehenden Wellenfunktionen zu berücksichtigen. Da an den Coulomb-Streuprozessen sowohl Zustände aus Elektron- als auch Zustände aus Lochsubbändern beteiligt sind, wird das entsprechende Überlappintegral und folglich das Matrixelement nur dann nicht verschwinden, wenn die Zustände im Elektronsubband valenzbandartige und die Zustände im Lochsubband leitungsbandartige Anteile enthalten. Aus diesem Grund muss die Bandstruktur mindestens mit einem 8×8 - $k \cdot p$ -Modell beschrieben werden (Kapitel 2.1.2), das die Kopplung von Valenz- und Leitungsbändern einschließt.

Mit der Auger-Rate lässt sich schließlich die Verluststromdichte angeben:

$$J_{\text{Auger}} = e N r_{\text{Auger}} = e \sum_{\lambda/\nu, \mathbf{k}} \frac{d}{dt} f_{\lambda/\nu, \mathbf{k}}^{e/h}. \quad (2.49)$$

3. (AlGaIn)As-basierte VECSEL-Systeme

Zu den etablierten aktiven Halbleitermedien für Laseranwendungen gehören (AlGaIn)As-Verbindungen. Das Materialsystem wird bereits als Verstärkungselement in optisch gepumpten Halbleiterscheibenlasern (engl.: *vertical-external-cavity surface-emitting laser*, VECSEL, oder *optically pumped semiconductor disk laser*, OPSDL) eingesetzt. Im Zentrum dieses Kapitels steht ein Entwurf für ein (AlGaIn)As-basiertes VECSEL-System, das im Infraroten bei einer Wellenlänge um 850 nm emittieren soll.

Das Konzept und die resultierenden Eigenschaften von VECSEL-Systemen werden in Kapitel 3.1 skizziert. Insbesondere werden mögliche Pumpmechanismen zur Steigerung der Leistungsfähigkeit vorgestellt, die speziell für VECSEL mit Wellenlängen um 850 nm diskutiert werden. Um ein grundlegendes Verständnis für das System und die dort stattfindenden Prozesse zu entwickeln, werden die Eigenschaften einer solchen (AlGaIn)As-basierten Struktur im Rahmen der mikroskopischen Theorie untersucht. Die Zusammensetzung der VECSEL-Struktur wird in Kapitel 3.2 vorgestellt, wobei auch die Einschlussfaktoren für die Lasermode diskutiert werden. Um das Design der Halbleiterstruktur zu spezifizieren, werden spektroskopische Experimente mit Hilfe des mikroskopischen Modells analysiert (Kapitel 3.3). Die Übereinstimmung von simulierten und gemessenen Spektren erlaubt schließlich eine Vorhersage der Verstärkungseigenschaften und Ladungsträgerverlustprozesse (Kapitel 3.4), die das Verhalten des VECSEL-Systems im Laserbetrieb bestimmen. Die Berechnungen werden in Kapitel 3.5 speziell genutzt, um das Potential und die Grenzen eines optischen *In-Well*-Pumpschemas für das (AlGaIn)As-basierte VECSEL-System einzuschätzen und zu bewerten.

3.1. Konzept des VECSEL-Systems

VECSEL-Systeme bilden eine Klasse von Halbleiterlasern, die hohe Ausgangsleistungen in einem Strahl mit zirkularem Intensitätsprofil nahezu beugungsbegrenzter Qualität emittieren. Im Folgenden wird die Funktionsweise des Lasersystems erläutert, und es werden verschiedene Pumpkonzepte, speziell im Hinblick auf das bei einer Wellenlänge von 850 nm emittierende VECSEL-System, diskutiert.

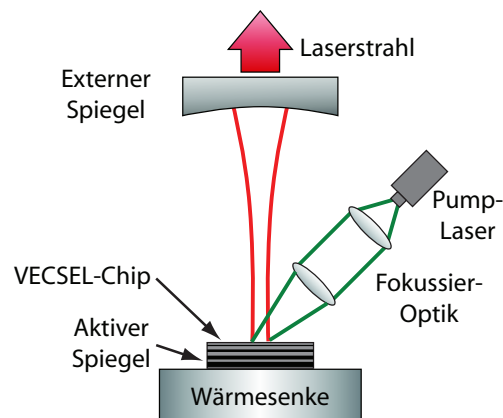


Abbildung 3.1.: Schematischer Aufbau eines VECSEL-Systems.

3.1.1. Funktionsprinzip

Die VECSEL-Technologie beruht auf Lichtverstärkung durch ein optisch gepumptes Halbleitermedium, das in einem externen Resonator eingebettet ist. Der Aufbau eines VECSEL-Systems ist schematisch in Abb. 3.1 skizziert. Die zentrale Komponente bildet ein epitaktisch hergestellter Halbleiterchip, der an ein Kühlsystem gekoppelt ist. Der Halbleiterchip setzt sich aus einem hoch-reflektierenden Bragg-Spiegel, der als Resonatorendspiegel dient, und einem aktiven Bereich, in dem die Lichtverstärkung generiert wird, zusammen. Daher spricht man auch vom aktiven Spiegel. Gepumpt wird der aktive Spiegel mit einem Diodenlaser, dessen Strahlung auf den Chip fokussiert wird. Um den Laserresonator zu schließen, wird ein dielektrischer Spiegel im Abstand von einigen Zentimetern von der Halbleiterscheibe angebracht. Da die optische Achse des Resonators senkrecht zu den Schichtebenen der Halbleiterstruktur verläuft, wird Laserlicht aus der Oberfläche des Halbleiterchips emittiert und kann schließlich durch den externen Spiegel ausgekoppelt werden.

Eigenschaften wie Strahlqualität und Strahldivergenz werden durch die Form des Resonators festgelegt [36]. Aus der zylindrischen Geometrie in Richtung der optischen Achse ergibt sich eine radialsymmetrische Intensitätsverteilung des Laserstrahls. So kann sich eine reine transversalelektromagnetische Grundmode (TEM_{00} -Mode) ausbilden, welche ein Gauß-förmiges Intensitätsprofil aufweist. Damit gelingt es schließlich, einen Laserstrahl niedriger Divergenz nahezu beugungsbegrenzter Qualität zu realisieren [37, 38].

Die Ausgangsleistung des VECSEL-Systems lässt sich über die Größe der gepumpten Fläche skalieren [39, 40]. Voraussetzung hierzu ist, dass der aktive Bereich im Laserbetrieb über die verspiegelte Seite des Halbleiterchips effektiv gekühlt wird. Da der Temperaturgradient in dieser Konfiguration entlang der Resonatorachse verläuft, Temperaturunterschiede in laterale Richtung hingegen weitgehend ausgeschlossen sind, können eine thermisch induzierte Linsenbildung und Depolarisationseffekte weitgehend vermieden werden. Im Idealfall stellt sich ein eindimensionaler Wärmefluss ein, so dass die Verlustwärme, die sich im aktiven Bereich während des Laserbetriebs entwickelt, auch bei größeren gepumpten Flächen effizient abgeführt wird. Auf diese

Weise kann man die VECSEL-Ausgangsleistung über die gepumpte Fläche - innerhalb gewisser Grenzen [41] - beliebig einstellen, und es lassen sich entsprechend hohe Laserleistungen erzielen. Der Laserhersteller „Coherent Inc.“ hat VECSEL-Systeme mit Ausgangsleistungen bis zu 30 W im Dauerstrichbetrieb vorgestellt [42].

Gerade die Kombination von hoher Laserleistung und hoher Strahlqualität zeichnet VECSEL-Systeme gegenüber anderen Typen von Halbleiterlasern aus. Elektrisch gepumpte VCSEL (engl.: *vertical-cavity surface-emitting laser*) emittieren zwar Laserlicht vergleichbarer Qualität, aber deren Ausgangsleistung beschränkt sich auf nur wenige Milliwatt [43]. Dagegen können kantenemittierende Diodenlaser hohe Ausgangsleistungen erreichen, allerdings bringt der asymmetrisch strukturierte Wellenleiter einen elliptischen Strahl hoher Divergenz mit sich [1]. Da ein VECSEL-System diesen Laserstrahl in einen Laserstrahl optimaler Qualität konvertieren kann, bieten sich die leistungsstarken Diodenlaser gerade zum Pumpen der VECSEL-Systeme an.

Die Emissionswellenlänge eines VECSEL-Systems kann weitgehend frei eingestellt und somit an spezifische Anwendungen angepasst werden. Prinzipiell lassen sich durch die Auswahl eines geeigneten Materialsystems Wellenlängen vom Ultraviolett bis ins mittlere Infrarot realisieren. Der zugängliche Wellenlängenbereich lässt sich durch das Einbringen eines optischen nicht-linearen Kristalls in den externen Resonator weiter ausdehnen, denn aufgrund der hohen resonatorinternen Laserintensität kann die Laserfrequenz z. B. durch die Erzeugung der zweiten Harmonischen im Kristall effizient verdoppelt werden.

VECSEL-Systeme vereinigen also die Vorteile von Halbleiterlasern, die sich durch ihre weitgehend frei einstellbare Emissionswellenlänge, ihre Effizienz und ihre kompakte Bauform auszeichnen, mit den Vorzügen eines Festkörperlasers, der hohe Ausgangsleistungen in einer guten Strahlqualität emittiert und dessen Resonator variabel gestaltet werden kann. Ein detaillierter Überblick zur aktuellen Forschung und Entwicklung von VECSEL-Systemen wird in [44, 45, 46, 47, 48] gegeben.

3.1.2. Pumpmethoden

Um die Leistungsfähigkeit von VECSEL-Systemen zu steigern, werden derzeit differenzierte optische Pumpkonzepte entwickelt und untersucht. Standardmäßig wird der aktive Bereich der Struktur über die Barrieren gepumpt, die das Laserlicht transmittieren, höherenergetisches Pumplicht aber effizient absorbieren. Durch den Pumpmechanismus werden in den Barrierenschichten Ladungsträger erzeugt, die unter Phononenbeteiligung stufenweise in Quantenfilmzustände relaxieren, so dass sich eine Besetzungsinversion aufbaut und Laserlicht emittiert werden kann. Abb. 3.2 (links) illustriert das Pumpschema für den Quantenfilm eines (AlGaIn)As-basierten VECSEL-Systems, das Laserlicht um eine Wellenlänge von 850 nm emittiert. Eine Alternative zum Barrierenpumpen bietet die Methode des optischen *In-Well*-Pumpens, die eine direkte Anregung von Quantenfilmzuständen bezeichnet [49, 50]. Bei dieser Pumptechnik wird längerwelliges Pumplicht verwendet, das nicht in den Barrieren sondern ausschließlich in den Quantenfilmen absorbiert wird (Abb. 3.2 (rechts)).

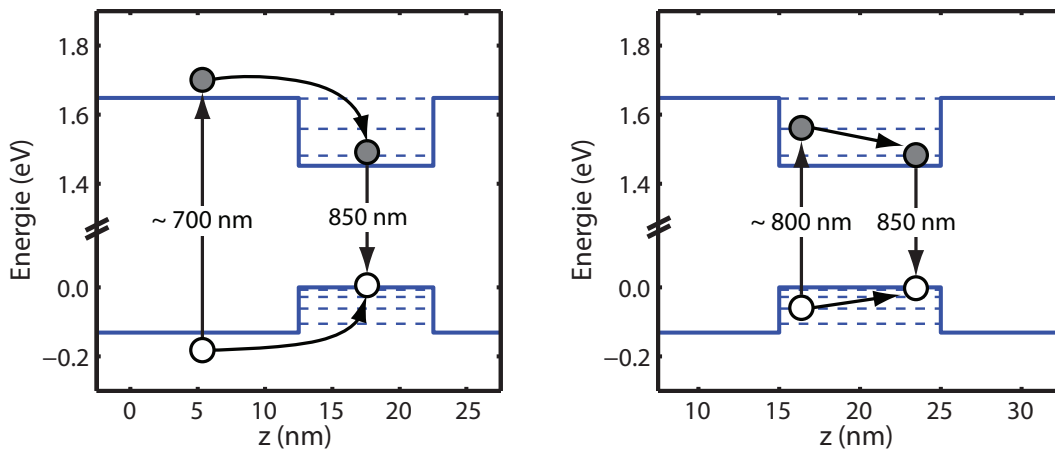


Abbildung 3.2.: Konzept des optischen Barrieren- (*links*) und *In-Well*-Pumpens (*rechts*). Dargestellt ist der Bandkantenverlauf des Leitungs- und Valenzbandes eines Quantenfilms des (AlGaIn)As-basierten VECSEL-Systems, das Licht um eine Wellenlänge von 850 nm emittiert. Die gestrichelten Linien kennzeichnen die einzelnen Elektron- und Schwerlochsbandenergien an der Bandkante.

Insgesamt erweitert das *In-Well*-Pumpkonzept also das Spektrum möglicher Pumpquellen, d. h. zum *In-Well*-Pumpen des (AlGaIn)As-basierten VECSEL-Systems könnte man speziell die leistungsstarken Diodenlaser mit Wellenlängen um 800 nm verwenden, die sich bereits als Pumpquellen für Nd:YAG-Hochleistungslaser etabliert haben. Standardmäßig werden kürzerwellige Diodenlaser, deren Pumpleistung deutlich kleiner ausfällt, eingesetzt, um VECSEL-Systeme mit Wellenlängen von 850 oder 670 nm zu betreiben, was die VECSEL-Ausgangsleistung gewöhnlich auf Werte unterhalb 1 W beschränkt [51, 52, 53, 54]. Für das (AlGaIn)As-basierte VECSEL-System kann mit einem Pumplaser bei 670 nm maximal eine Ausgangsleistung von 0.7 W realisiert werden [55]. Greift man hingegen das *In-Well*-Pumpschema auf und setzt einen längerwelligen, leistungsstarken Diodenlaser ein, lässt sich die Laserleistung für das System im Vergleich zum Barrierenpumpen fast verdoppeln [56].

Darüber hinaus verbessert das *In-Well*-Pumpen die Leistungseffizienz des VECSEL-Systems gegenüber dem Barrierenpumpen. Grundsätzlich ist die Effizienz wegen der Energiedifferenz von Pump- und Laserlicht beschränkt, denn dieser Betrag kann nicht zur Generation von Laserleistung eingebracht werden, sondern wird durch Streuprozesse vollständig in Wärme umgesetzt. Je nach thermischer Konfiguration des VECSEL-Chips heizt sich der aktive Bereich der Struktur auf, so dass der Laserbetrieb beeinträchtigt wird, bis es schließlich zum thermischen Überrollen kommt, d. h. ab einer bestimmten Pumpleistung bricht die Ausgangsleistung trotz steigender Pumpleistung ein [57]. Da das Quantendefizit und damit die Wärmeerzeugung beim *In-Well*-Pumpen gegenüber dem Barrierenpumpen reduziert ist, verzögert das *In-Well*-Pumpen thermisches Überrollen, und damit können prinzipiell höhere Ausgangsleistungen erreicht werden.

Die Schwierigkeit des *In-Well*-Pumpens besteht allerdings in einer effektiven Absorption des Pumplichts. Während das Pumplicht beim Barrierenpumpen durch die breiten Schichten in einem Durchgang effizient absorbiert werden kann, stehen beim *In-Well*-Pumpen nur die schmalen

Quantenfilmschichten als Absorber zur Verfügung. Aufgrund der reduzierten Absorptionslänge (größenordnungsmäßig 10 nm breite Quantenfilme gegenüber 100 nm breiten Barrieren) kann somit – in einer einfachen Pumpgeometrie – nur ein entsprechend kleiner Anteil des Pumplichts zur Anregung genutzt werden. Außerdem können Resonanzeffekte die Propagation des Pumplichts innerhalb der Struktur zusätzlich beeinträchtigen.

Problematisch ist zudem die Einwirkung der Pumpintensität auf das Absorptionsvermögen der Quantenfilme an der Pumpwellenlänge, denn mit steigender Ladungsträgerdichte im Quantenfilm bleicht die Absorption zunehmend aus. Diese nachteilige Reduktion der Pumpabsorption kommt umso mehr zum Tragen, je geringer die Differenz von Pumpwellenlänge und Laserwellenlänge ist. Andererseits ist diese Situation aber gerade zur Minderung des Quantendefizits wünschenswert. Es stellt sich also die Frage, wie dicht Pumpwellenlänge und Laserwellenlänge beieinander liegen können, ohne dass Sättigungseffekte der Absorption an der Pumpwellenlänge zu groß werden und die Effizienz des VECSEL-Systems limitieren.

Um die Effektivität der Pumpabsorption untersuchen und beurteilen zu können, ist eine genaue, quantitative Beschreibung der optischen Eigenschaften des VECSEL-Systems gefragt. Experimentell kann zwar eine Lasercharakteristik für eine spezielle Struktur ermittelt werden, aber die Auswertung ist auf bestimmte Betriebsbedingungen beschränkt; insbesondere machen die begrenzte Durchstimmbarkeit und Verfügbarkeit von Pump Lasern eine systematische Untersuchung über einen weiten Wellenlängenbereich unmöglich. Zudem erschwert die Wellenselektion der dielektrischen Struktur eine experimentelle Charakterisierung, so dass sich relevante Prozesse für den Laserbetrieb auf diese Weise nur eingeschränkt identifizieren lassen. Mit dem mikroskopischen Modell (Kapitel 2) können die Eigenschaften hingegen systematisch analysiert werden. Da die Theorie das Zusammenwirken von Eigenschaften des Verstärkungsmediums einerseits und der dielektrischen Struktur andererseits quantitativ beschreibt, kann auf dieser Basis ein Verständnis für die zugrunde liegenden Mechanismen entwickelt werden.

Damit eignet sich mikroskopische Ansatz speziell zur Untersuchung des *In-Well*-Pumpens im (AlGaIn)As-basierten VECSEL-System, mit dem langfristigen Ziel, das Lasersystem in Hinblick auf Anwendungen zu optimieren und weiterzuentwickeln. Ein Einsatzgebiet, in dem sich das System etabliert, ist die Atomspektroskopie; beispielsweise bietet sich die Emissionswellenlänge von 850 nm zur Laserkühlung von Cäsium-Atomen an [58, 59].

3.2. Aufbau der Halbleiterstruktur

Untersucht wird der Entwurf einer (AlGaIn)As-basierten VECSEL-Struktur¹. Sie ist für eine Laserwellenlänge um 850 nm vorgesehen.

Der Bragg-Spiegel des VECSEL-Systems wird auf einem GaAs-Substrat gitterangepasst mit 30 abwechselnden Schichten von AlAs und (Al_{0,18}Ga_{0,82})As realisiert. Die Materialien haben

¹Die Probenstruktur ist von J. S. Roberts (University of Sheffield, Sheffield, UK) mittels metallorganischer Gasphasenepitaxie hergestellt worden.

einen verschwindenden Absorptionskoeffizienten im Bereich der angestrebten Laserwellenlänge von 850 nm, weisen aber gleichzeitig einen relativ großen Kontrast ihrer Brechungsindizes auf (Abb. 3.3 (oben)). Unter diesen Voraussetzungen lässt sich der reflektierte Anteil einer einfallenden Lichtwelle durch konstruktive Interferenzeffekte sukzessive erhöhen. Um eine nahezu vollständige Reflexion des Laserlichts am Bragg-Spiegel zu gewährleisten, sind die optischen Dicken der einzelnen Schichten gerade so gewählt, dass sie jeweils ein Viertel der vorgesehenen Laserwellenlänge betragen.

An den Bragg-Spiegel schließt der aktive Bereich an. Er enthält 17 kompressiv verspannte Quantenfilme, die nominell jeweils 10 nm breit sind, aus $(\text{Al}_{0.115}\text{Ga}_{0.785}\text{In}_{0.10})\text{As}$ bestehen und in $(\text{Al}_{0.26}\text{Ga}_{0.74})\text{As}$ -Barrieren eingebettet sind. Theoretisch ließe sich die Emissionswellenlänge der Quantenfilme auch mit Schichten aus einfachem GaAs realisieren. Es hat sich allerdings gezeigt, dass Lasersysteme mit herkömmlichen GaAs-Quantenfilmen schneller altern, da sie die Ausbildung von Versetzungslinien aus dem Substrat in den aktiven Bereich im Laserbetrieb begünstigen [60, 61]. Das Versetzungsklettern kann durch Beimischungen von Indium, das sich durch relativ große Atome auszeichnet, aufgehalten werden. Das VECSEL-System mit dem komplexeren, quaternären (AlGaIn)As-Material bietet somit eine vergleichsweise hohe Stabilität für den Laserbetrieb [55].

Die Quantenfilme sind in der Struktur so positioniert, dass sie mit den Maxima des Stehwellenfeldes der vorgesehenen Lasermode um 850 nm zusammenfallen (Abb. 3.3 (unten)). Da die aktiven Schichten in dieser Anordnung optimal mit dem Lichtfeld überlappen, nimmt der zugehörige Einschlussfaktor für die Lasermode ein Maximum an. Mit dem Arrangement der Quantenfilme in einer solchen, so genannten RPG-Struktur (engl.: *resonant periodic gain structure*) [62, 63] ist also eine resonante Erhöhung der optischen Verstärkung an der Laserwellenlänge zu erwarten.

Zwischen den Quantenfilmen und den Barrieren sind jeweils 5 nm breite Schichten aus $(\text{Al}_{0.115}\text{Ga}_{0.785}\text{In}_{0.10})(\text{As}_{0.82}\text{P}_{0.18})$ eingefügt. Die Zwischenschichten reduzieren Verspannungseffekte, die sich aus der unterschiedlichen Gitterkonstante des Quantenfilmmaterials im Vergleich zu den anderen Schichten der Struktur ergeben. Da die Bandlücke des quaternären Materials in etwa mit der Bandlücke der äußeren $(\text{Al}_{0.26}\text{Ga}_{0.74})\text{As}$ -Barrieren übereinstimmt, kann in den mikroskopischen Simulationen aber zur Vereinfachung angenommen werden, dass die Quantenfilme ausschließlich von $(\text{Al}_{0.26}\text{Ga}_{0.74})\text{As}$ umgeben sind.

Um Rekombinationen der Ladungsträger an der Oberfläche der Struktur zu unterbinden, ist der aktive Bereich durch eine Fensterschicht aus $(\text{Al}_{0.50}\text{Ga}_{0.50})\text{As}$ abgeschlossen, die sowohl das Laser- als auch das Pumplicht transmittiert. Aufgrund ihrer vergleichsweise großen Bandlückenenergie schließt sie die Ladungsträger im aktiven Bereich ein, so dass die Quantenfilme effizient mit Ladungsträgern versorgt werden können. Als oberste Schicht ist eine dünne $\text{Ga}(\text{As}_{0.90}\text{P}_{0.10})$ -Schicht aufgebracht, die die VECSEL-Struktur vor Oxidation an Luftsauerstoff schützt. Nähere Erläuterungen zum Entwurf und Wachstum der Probenstruktur findet man in [55].

Die verschiedenen Komponenten der Struktur führen zu Stufen im Brechungsindexprofil, die die optischen Eigenschaften des VECSEL-Systems maßgeblich bestimmen. Für die Modellierung des Laserverhaltens ist es also entscheidend, die dielektrische Umgebung der Quan-

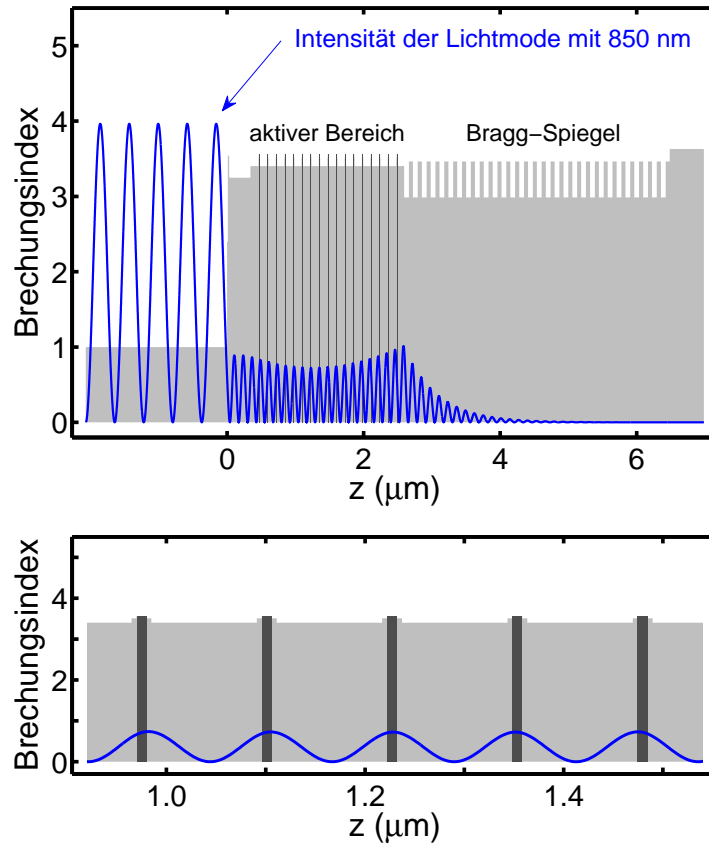


Abbildung 3.3.: (oben) Brechungsindexprofil der VECSEL-Struktur bei einer Temperatur von 300 K (schattierte Fläche). Der aktive Bereich enthält nominell 17 kompressiv gespannte $(\text{Al}_{0.115}\text{Ga}_{0.785}\text{In}_{0.10})\text{As}$ -Quantenfilme mit $(\text{Al}_{0.26}\text{Ga}_{0.74})\text{As}$ -Barrieren und ist auf einem Bragg-Spiegel aus 30 $\text{AlAs}/(\text{Al}_{0.18}\text{Ga}_{0.82})\text{As}$ -Schichtpaaren abgeschieden. Die Quantenfilmpositionen sind dunkelgrau markiert. Die blaue Kurve zeigt die Intensitätsverteilung der Lichtmode einer Wellenlänge von 850 nm und wurde mit Hilfe der Transfermatrixmethode (Kapitel 2.2.2) berechnet. (unten) Brechungsindexprofil und Intensitätsverteilung der Lasermode innerhalb der RPG-Struktur.

tenfilme so genau wie möglich zu beschreiben. Im Fall von $(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x})\text{As}$ ($x = 0.18, 0.26, 0.5, 1.0$) und $\text{Ga}(\text{As}_{0.90}\text{P}_{0.10})$ werden die Brechungsindizes aus [64] und [65] extrahiert, wobei auch ihre Indexdispersion in die Simulation einbezogen wird. Der Brechungsindex von $(\text{Al}_{0.115}\text{Ga}_{0.785}\text{In}_{0.10})(\text{As}_{0.82}\text{P}_{0.18})$ wird linear aus den Werten der binären Materialien interpoliert, die [14] bei einer Wellenlänge um 850 nm entnommen sind. Analog wird auch der Hintergrundbrechungsindex für die $(\text{Al}_{0.115}\text{Ga}_{0.785}\text{In}_{0.10})\text{As}$ -Quantenfilme berechnet. Das resultierende Brechungsindexprofil bei Raumtemperatur ist in Abb. 3.3 dargestellt.

Je größer der Brechungsindexkontrast zweier benachbarter Schichten ist, um so größer ist das Reflexionsvermögen der jeweiligen Grenzfläche. Wegen des großen Brechungsindexsprungs beim Übergang von Luft ins Halbleitermaterial bildet die Halbleiteroberfläche zusammen mit dem Bragg-Spiegel auf der anderen Seite einen Mikroresonator, so dass sich die Intensität des Licht-

felds innerhalb der Struktur bei bestimmten Wellenlängen durch konstruktive Interferenz maximal erhöht. Für die angestrebte Laserwellenlänge von 850 nm, die durch das RPG-Arrangement definiert ist, ist die Struktur aber nicht resonant. Vielmehr weist die zugehörige Mode einen Knoten an der Halbleiteroberfläche auf und die Intensität wird innerhalb der Struktur durch destruktive Interferenzeffekte reduziert (Abb. 3.3 (oben), blaue Kurve). Das anti-resonante Design ist beispielsweise für die Erzeugung kurzer Laserpulse von Interesse [66], bei der eine große spektrale Bandbreite der Verstärkung gefragt ist. Diese wird gerade dadurch bereit gestellt, dass der Mikroresonator bezüglich der Laserwellenlänge verstimmt ist. So verringert sich zwar der räumliche Überlapp der Lasermode mit den aktiven Quantenfilmen, aber dafür hängt die Größe des Überlapps – im Gegensatz zum resonanten Design – deutlich weniger von der Wellenlänge ab, was eine scharfe Modenselektion aufhebt.

Der Überlapp einer Lichtmode mit den aktiven Quantenfilmschichten kann insgesamt durch den effektiven Einschlussfaktor der VECSEL-Struktur beschrieben werden, der sich aus dem optischen Einschlussfaktor durch das RPG-Arrangement und dem Einschlussfaktor durch den Mikroresonator zusammensetzt. Der externe Resonator muss dabei nicht explizit berücksichtigt werden, da seine Länge mit mehreren Zentimetern deutlich größer als die Laserwellenlänge ist und somit nicht wesentlich zur Modenselektion beiträgt.

3.3. Optische Charakterisierung

Um die VECSEL-Struktur zu charakterisieren, werden spektroskopische Experimente mit Hilfe des mikroskopischen Modells analysiert. Untersucht werden die Reflexions- und Photolumineszenzeigenschaften, da anhand der gewonnenen Spektren grundlegende Merkmale der Probenstruktur identifiziert werden können.

3.3.1. Analyse des Reflektivitätsspektrums

Das Reflexionsvermögen der VECSEL-Struktur wird maßgeblich durch Interferenzeffekte bestimmt, denn an jeder Grenzfläche zwischen zwei benachbarten Schichten wird eine einfallende Lichtwelle teilweise reflektiert und teilweise transmittiert. Um die zugehörigen Reflexions- und Transmissionskoeffizienten zu berechnen, wird die Transfermatrixmethode (Kapitel 2.2.2) angewendet. Modelliert werden die Reflexionseigenschaften der Halbleiterstruktur bei Raumtemperatur für die Situation, dass eine Lichtwelle senkrecht zur Oberfläche in Wachstumsrichtung der Probe einfällt. Diese Bedingungen entsprechen gerade der experimentellen Realisierung, so dass ein direkter Vergleich mit einer Messung möglich wird.

Lässt man die optische Antwort der aktiven Quantenfilmschichten auf das einfallende Lichtfeld zunächst unberücksichtigt und beschreibt die einzelnen Schichten in der Simulation stattdessen allein durch ihre Hintergrundbrechungsindizes, so ergibt sich ein Spektrum mit einem hoch-reflektierenden Bereich, dem so genannten Stopp-Band, an das eine Vielzahl kleinerer In-

terferenzmaxima und -minima angrenzen (Abb. 3.4 (oben), grüne Linie). Das Stopp-Band ist um eine Wellenlänge von 836 nm zentriert und weist eine spektrale Breite von 84 nm auf, so dass eine hohe Reflektivität für einen Bereich um die vorgesehene Laserwellenlänge sichergestellt ist. Dabei sind Lage und Breite des Stopp-Bandes im Wesentlichen durch die Schichtdicken, den Brechungsindexkontrast und die Anzahl der Schichten im Bragg-Spiegel bestimmt.

Für eine vollständige Beschreibung der Charakteristika der Probenstruktur ist es aber entscheidend, die optoelektronischen Eigenschaften der aktiven Schichten in die Simulation einzubeziehen. Aus diesem Grund wird die wellenlängenabhängige optische Suszeptibilität der Quantenfilme mit Hilfe der Halbleiter-Bloch-Gleichungen (Kapitel 2.2.1) berechnet. Die Ergebnisse für einen 10 nm breiten $(\text{Al}_{0.108}\text{Ga}_{0.785}\text{In}_{0.107})\text{As}$ -Quantenfilm, der von Barrieren aus $(\text{Al}_{0.26}\text{Ga}_{0.74})\text{As}$ umgeben ist, sind in Abb. 3.4 (unten) gezeigt, wobei eine Temperatur von 300 K und eine niedrige Ladungsträgerdichte vorgegeben wurden. Der Realteil der optischen Suszeptibilität ist dabei mit der induzierten Änderung des Brechungsindex im Quantenfilm verknüpft, während der Imaginärteil die Absorption in der Schicht bestimmt. Offensichtlich dominieren in dem betrachteten Wellenlängenbereich drei exzitonische Signaturen. Sie sind auf optische Übergänge zwischen dem tiefsten Elektron- und dem tiefsten Lochsubband (e1-h1), zwischen dem tiefsten Elektron- und dem viertiefsten Lochsubband (e1-h4) und zwischen dem zweittiefsten Elektron- und dem zweittiefsten Lochsubband (e2-h2) zurückzuführen, die sich jeweils durch hohe optische Dipolmatrixelemente auszeichnen. Die Spektren schließen eine inhomogene Verbreiterung mit einer Halbwertsbreite von 8 meV ein, die durch kleine Wachstumsinhomogenitäten der Probe zustandekommen kann.

Die mikroskopischen Spektren werden schließlich durch die Einführung modifizierter wellenlängenabhängiger, komplexer Brechungsindizes in den Transfermatrixformalismus eingebracht. Auf diese Weise lässt sich der Anteil der Lichtintensität berechnen, der tatsächlich von der Probenstruktur reflektiert wird (Abb. 3.4 (oben), blaue Linie). Insgesamt beobachtet man eine Reduktion der Reflektivität in dem Wellenlängenbereich, in dem das Quantenfilmmaterial absorbierend wirkt. Da der Anteil der absorbierten Intensität durch den effektiven Einschlussfaktor der VECSEL-Struktur je nach Wellenlänge überhöht bzw. unterdrückt wird, hängt die Reduktion der Reflektivität wesentlich von der Wellenlänge ab. So bilden sich bei Wellenlängen von 812 und 840 nm ausgeprägte Einbrüche der Reflektivität aus. Diese Wellenlängen stellen gerade Resonanzen der dielektrischen Struktur dar, was eine Erhöhung der Lichtintensität im Inneren der Struktur mit sich bringt, so dass auch die internen Absorptionsverluste steigen, die schließlich die Ausbildung der beiden Minima im Stopp-Band zur Folge haben. Der Reflektivitätseinbruch bei 840 nm ist darauf zurückzuführen, dass die e1-h1-Resonanz der Quantenfilme mit einer Resonanz durch die dielektrische Struktur zusammenfällt. In diesem spektralen Bereich ist somit die Emissionswellenlänge des VECSELs zu erwarten.

Die charakteristischen Signaturen des Reflektivitätsspektrums können auch im experimentellen Spektrum² identifiziert werden (Abb. 3.4 (oben), rote Linie). Um die theoretischen Ergebnisse mit der Messung in Übereinstimmung zu bringen, musste das zugrunde liegende Suszeptibi-

²Das Reflexionsspektrum ist experimentell von T. Ackemann und W. Zhang (University of Strathclyde, Glasgow, UK) aufgenommen worden.

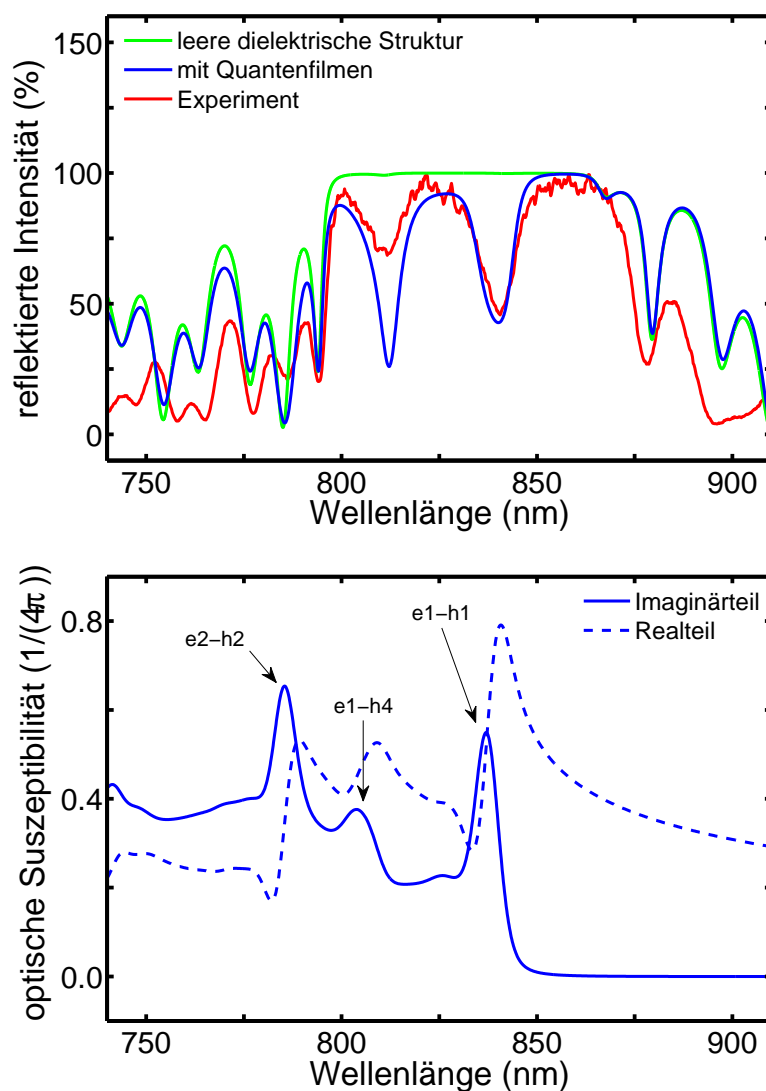


Abbildung 3.4.: (oben) Vergleich des modellierten (blaue Linie) und des gemessenen (rote Linie) Reflektivitätsspektrums der VECSEL-Struktur unter senkrechtem Einfall bei einer Temperatur von 300 K. In die Simulation sind mikroskopisch berechnete Absorptionsspektren für die Quantenfilme eingegangen. Lässt man die optische Antwort der Quantenfilme auf das Lichtfeld unberücksichtigt, ergibt sich das Spektrum, das grün eingezeichnet ist. Das Experiment wurde von T. Ackemann und W. Zhang (University of Strathclyde, Glasgow, UK) durchgeführt. (unten) Berechneter Imaginärteil (durchgezogene Linie) und Realteil (gestrichelte Linie) der optischen Suszeptibilität eines 10 nm breiten $(\text{Al}_{0.108}\text{Ga}_{0.785}\text{In}_{0.107})\text{As}$ -Quantenfilms mit $(\text{Al}_{0.26}\text{Ga}_{0.74})\text{As}$ -Barrieren bei einer Temperatur von 300 K, einer Ladungsträgerdichte von $2 \cdot 10^9 \text{ cm}^{-2}$ und einer inhomogenen Verbreiterung von 8 meV. Die Spektren liegen dem modellierten Reflektivitätsspektrum der VECSEL-Struktur zugrunde.

liätsspektrum für den nominellen Quantenfilm aus $(\text{Al}_{0.115}\text{Ga}_{0.785}\text{In}_{0.10})\text{As}$ in der Simulation um 18 meV zu kleineren Energien verschoben werden, was einer Rotverschiebung von 10 nm entspricht. Andernfalls würde man den Reflektivitätseinbruch bei 840 nm nicht beobachten, und

es würde sich im Stopp-Band nur ein Reflektivitätseinbruch zeigen. Je weiter die exzitonische Resonanz des Quantenfilms aber zu größeren Wellenlängen rückt, umso mehr koppelt sie an die benachbarte Resonanz der dielektrischen Struktur, so dass sich ein zweiter Einbruch der Reflektivität im Stopp-Band ausbildet. Mit einer Korrektur der spektralen Position der Quantenfilmsuszeptibilität um insgesamt 18 meV liegen die beiden Minima schließlich genau bei den Wellenlängen, wie sie im Experiment beobachtet werden.

Verschiebungen dieser Größenordnung sind nicht ungewöhnlich, denn zum einen haften an den Materialparametern, die im Modell verwendet werden, bestimmte Unsicherheiten, beispielsweise gibt es einen Fehlerbereich für die Interpolation zur Bestimmung der fundamentalen Bandlücke des quaternären Quantenfilmmaterials aus den binären Komponenten [14, 15]. Zum anderen kann die tatsächlich hergestellte Probenstruktur von den vorgegebenen, nominellen Strukturparametern abweichen. Insbesondere kann eine Modifikation der Breite oder Materialzusammensetzung des Quantenfilms eine Verschiebung der exzitonischen Resonanzen erklären. Wenn man beispielsweise davon ausgeht, dass der Quantenfilm 10.7 % Indium anstatt der nominellen 10 % enthält, so schiebt die Absorptionskante gerade um 18 meV zu kleineren Energien, womit man die demonstrierte Übereinstimmung zwischen Theorie und Experiment erzielt. Aus dem Vergleich der Reflektivitätsspektren lassen sich also Spezifikationen des Quantenfilms mit hoher Genauigkeit extrahieren.

Die Abweichungen zwischen dem modellierten und dem gemessenen Reflektivitätsspektrum außerhalb des Stopp-Bands liegen in Unsicherheiten der Dicken und Brechungsindizes der einzelnen Schichten begründet. Weil die Struktur aus mehr als 130 Schichten besteht, wirken sich schon kleine Modifikationen der gewählten Strukturparameter wesentlich auf die Interferenzmaxima und -minima im Spektrum aus. Grundsätzlich ließe sich die Wiedergabe des experimentellen Spektrums durch die Theorie also weiter optimieren, indem man die Parameter aller Schichten der Struktur entsprechend anpasst. Auf eine genauere Feineinstellung soll aber verzichtet werden, da der Bereich außerhalb des Stopp-Bandes für die weiteren Untersuchungen nicht relevant ist.

3.3.2. Analyse des Photolumineszenzspektrums

Eine weitere, geeignete Methode zur Charakterisierung der Probenstruktur stellen Photolumineszenzuntersuchungen dar. Dabei wird die Lumineszenz aus der Oberfläche der Probe bestimmt, die nach einer optischen Anregung des Systems entsteht.

Um die spontanen Emissionsprozesse im aktiven Bereich zu ermitteln, werden zunächst die Halbleiter-Lumineszenz-Gleichungen (Kapitel 2.3.1) für einen einzelnen Quantenfilm der Struktur gelöst. Durchgeführt werden die Berechnungen wie in Kapitel 3.3.1 für einen 10 nm breiten $(\text{Al}_{0.108}\text{Ga}_{0.785}\text{In}_{0.107})\text{As}$ -Quantenfilm mit $(\text{Al}_{0.26}\text{Ga}_{0.74})\text{As}$ -Barrieren bei einer Temperatur von 300 K und einer inhomogenen Verbreiterung mit einer Halbwertsbreite von 8 meV, allerdings wird für die Bestimmung der Lumineszenz eine erhöhte Ladungsträgerdichte von $2 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ eingesetzt. Da die Analyse der Reflektivität auf eine spektrale Verschiebung der optischen Ant-

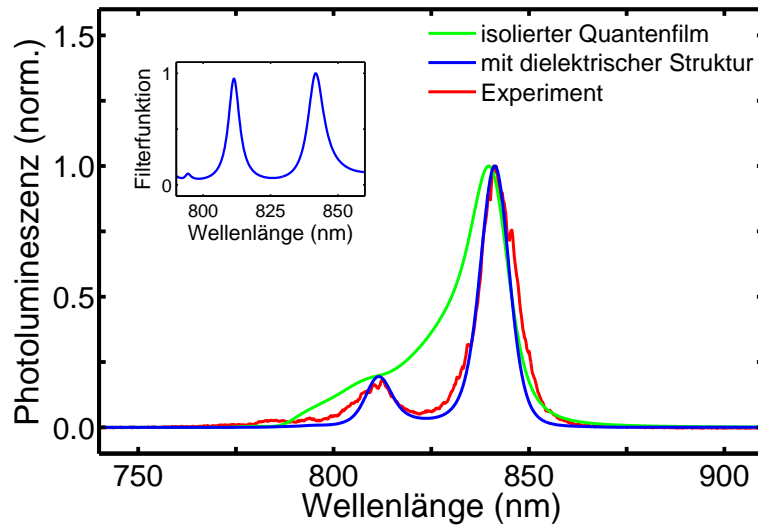


Abbildung 3.5.: Vergleich des modellierten (blaue Linie) und des gemessenen (rote Linie) Photolumineszenzspektrums der VECSEL-Struktur unter senkrechtem Einfall bei einer Temperatur von 300 K. Die Simulation berücksichtigt Resonatoreffekte der dielektrischen Struktur, indem das Lumineszenzspektrum eines einzelnen Quantenfilms (grüne Linie) mit der wellenlängenabhängigen Filterfunktion für die VECSEL-Struktur, die in der Einfügung dargestellt ist, multipliziert wird. In der mikroskopischen Berechnung des Lumineszenzspektrums wird ein 10 nm breiter $(\text{Al}_{0.108}\text{Ga}_{0.785}\text{In}_{0.107})\text{As}$ -Quantenfilm mit $(\text{Al}_{0.26}\text{Ga}_{0.74})\text{As}$ -Barrieren bei einer Ladungsträgerdichte von $2 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ und einer inhomogenen Verbreiterung von 8 meV angenommen. Das Experiment wurde von T. Ackemann und W. Zhang (University of Strathclyde, Glasgow, UK) durchgeführt.

wort des Quantenfilms hingewiesen hat, wird für die Indiumkonzentration im Quantenfilm ein Wert von 10.7 % anstelle des nominellen Werts von 10 % verwendet. Damit erhält man ein Photolumineszenzspektrum mit einem Maximum bei einer Wellenlänge von 840 nm (Abb. 3.5, grüne Linie). Das Signal ist im Wesentlichen durch Rekombinationsprozesse von Ladungsträgern durch e1-h1-Übergänge hervorgerufen, höhere Interbandübergänge zeigen sich nur in der schwächeren Signatur um eine Wellenlänge von 811 nm.

Das Photolumineszenzspektrum der Quantenfilme wird jedoch bei der Emission aus der Probenoberfläche durch Resonatoreffekte der Halbleiterstruktur verändert. Um diese in die Simulation einfließen zu lassen, wird die Filterfunktion (Kapitel 2.3.2) ausgewertet, die die dielektrische Umgebung der Quantenfilme berücksichtigt. Im relevanten Bereich zeichnet sie sich durch zwei Maxima bei Resonanzwellenlängen der Struktur aus, innerhalb derer Strahlung aus der Struktur emittiert werden kann (Einfügung in Abb. 3.5). Das Produkt aus der Filterfunktion und der Photolumineszenz eines einzelnen Quantenfilms liefert schließlich das Emissionsspektrum, das an der Oberfläche der Struktur zu erwarten ist (Abb. 3.5, blaue Linie). Aufgrund der spektralen Filterung wird die Emission bei bestimmten Wellenlängen unterdrückt bzw. überhöht, und es formen sich zwei ausgeprägte Signaturen reduzierter Linienbreite.

Auf diese Weise gelingt es, die Emissionseigenschaften der Probenstruktur wiederzugeben, die

experimentell³ beobachtet worden sind (Abb. 3.5, rote Linie). Sowohl die Position als auch die Linienform der Signale stimmt mit den theoretischen Ergebnissen überein.

Fazit

Die Reflektivitäts- und die Photolumineszenzanalyse stellen unabhängige Charakterisierungsmethoden dar, um Spezifikationen der Laserstruktur zu identifizieren. Die Spektren reagieren besonders sensitiv auf die Resonanzen der Struktur und die Absorptions- bzw. Emissionseigenschaften der Quantenfilme. Dies sind gerade kritische Größen, da sie Charakteristika des VECSEL-Systems im Laserbetrieb bestimmen werden.

Aus dem Vergleich von theoretischen und experimentellen Spektren können Abweichungen der tatsächlich vorliegenden Probenstruktur von den nominellen Parametern mit hoher Genauigkeit aufgedeckt werden. Die optimierten Strukturparameter, die verwendet worden sind, um sowohl eine Übereinstimmung der Reflektivitätsspektren (Abb. 3.4) als auch eine Übereinstimmung der Photolumineszenzspektren (Abb. 3.5) zu erzielen, sind in Tab. A.1 im Anhang zusammengefasst. Insgesamt beträgt die Abweichung der Schichtdicken von den nominellen Werten, die in [55] aufgeführt sind, weniger als 5 %. Darüber hinaus wird der Indiumgehalt des Quantenfilmmaterials von 10 % auf 10.7 % korrigiert. Alle nachfolgenden Untersuchungen zu der Probenstruktur werden auf der Basis dieses angepassten Parametersatzes durchgeführt.

3.4. Lasereigenschaften

Sobald man die VECSEL-Struktur ausreichend pumpt und den externen Resonator mit einem Auskoppelspiegel schließt, kann Laserlicht emittiert werden. Die optischen Verstärkungseigenschaften und Verlustprozesse des Systems, die im Laserbetrieb relevant sind, werden im Folgenden ausgewertet und diskutiert.

3.4.1. Optische Verstärkung

Wird die Probenstruktur mit Hilfe einer externen Laserdiode angeregt, werden Ladungsträger in den Halbleiterschichten erzeugt. Diese relaxieren durch Streuprozesse zu niedrigen Energien und besetzen schließlich Zustände nahe der Bandkante in den Quantenfilmen. Damit verändert sich die optische Antwort dieser Schichten auf ein einfallendes Lichtfeld grundlegend.

Die Abhängigkeit der Absorption von der Anregungsintensität wird für den $(\text{Al}_{0.108}\text{Ga}_{0.785}\text{In}_{0.107})\text{As}$ -Quantenfilm mit $(\text{Al}_{0.26}\text{Ga}_{0.74})\text{As}$ -Barrieren ermittelt, indem die Halbleiter-Bloch-Gleichungen unter der Annahme verschiedener Ladungsträgerdichten gelöst werden. Die Verteilung der Ladungsträger auf die einzelnen Subbandzustände wird dabei mit

³Das Photolumineszenzspektrum ist experimentell von T. Ackemann und W. Zhang (University of Strathclyde, Glasgow, UK) aufgenommen worden.

Fermi-Funktionen beschrieben, die sich im Quasi-Gleichgewicht der Anregung einstellen. Damit ergeben sich bei einer Temperatur von 300 K die Absorptionsspektren, die in der Einfügung in Abb. 3.6 (oben) dargestellt sind. Während das Spektrum im Fall niedriger Ladungsträgerdichte durch ausgeprägte exzitonische Resonanzen verschiedener Interbandübergänge des Quantenfilms charakterisiert ist, bleichen die Signaturen bei steigender Anregung des Systems aus. So sättigt mit zunehmender Ladungsträgerdichte zunächst die Absorption am e1-h1-Übergang, und sobald sich eine Besetzungsinversion einstellt, nimmt die Absorption schließlich negative Werte an. In dem betroffenen Wellenlängenbereich um 848 nm wird also optischer Materialgewinn erzielt, d. h. ein einfallendes Lichtfeld kann durch die aktiven Quantenfilme verstärkt werden.

Die Absorptions- bzw. Materialgewinnspektren sowie die zugehörigen Brechungsindexdispersion des Quantenfilmmaterials stellen die entscheidenden Faktoren dar, um die Lichtverstärkung zu berechnen, die sich durch das VECSEL-System insgesamt ergibt. Die Wellenlängenselektion durch die dielektrische Struktur wird dabei wie in Kapitel 3.3.1 im Rahmen der Transfermatrixmethode eingebunden. Auf diese Weise kann der Anteil der Lichtintensität ermittelt werden, der durch die VECSEL-Struktur zurückgeworfen wird; Abb. 3.6 (oben) zeigt die berechneten Spektren für fünf verschiedene Anregungsstufen im Überblick.

Bei einer Ladungsträgerdichte von $3 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ pro Quantenfilm stellen die aktiven Schichten Materialgewinn an der zentralen Resonanzwellenlänge der Struktur bereit, so dass sich auf dem Stopp-Band bei einer Wellenlänge von 843 nm eine Spitze der Reflektivität ausbildet. Im Vergleich zu dem entsprechenden Reflektivitätseinbruch im Niedrigdichtefall ist die Reflektivitätsspitze um 3 nm zu größeren Wellenlängen verschoben, was sich durch die Änderung des Überlapps der Resonanz der dielektrischen Struktur und der optischen Antwort der Quantenfilme aufgrund der modifizierten Suszeptibilitätsspektren erklärt.

Offensichtlich wird innerhalb der Spitze bei Wellenlängen um 843 nm mehr als 100 % der einfallenden Lichtintensität reflektiert, d. h. in diesem Wellenlängenbereich verstärkt das VECSEL-System. Da die Amplitude des Materialgewinns in den Quantenfilmen mit zunehmender Ladungsträgerdichte steigt, wächst auch die Intensität der Verstärkung entsprechend. Neben der größeren Amplitude führt eine erhöhte Ladungsträgerdichte im Quantenfilm aber auch zu einer spektralen Verbreiterung des Materialgewinns: Bei einer Ladungsträgerdichte von $5 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ pro Quantenfilm wird der Transparenzpunkt bereits bei einer benachbarten Resonatorwellenlänge erreicht, so dass sich ein zweiter Bereich der Lichtverstärkung um eine Wellenlänge von 813 nm zeigt. Im Hinblick auf den Laserbetrieb ist allerdings nur die zentrale Reflektivitätsspitze relevant, die eine Laserwellenlänge von 843 nm bei Raumtemperatur definiert.

Im Experiment wird an der Schwelle Laseremission bei einer Wellenlänge von 850 nm beobachtet⁴. Die Differenz zu der theoretisch erwarteten Emissionswellenlänge von 843 nm lässt sich letztendlich auf thermische Effekte zurückführen: Da die absorbierte Pumpleistung nicht vollständig in Laserleistung umgesetzt werden kann, heizt sich die Halbleiterstruktur während des Laserbetriebs auf. Um die entstehende Verlustwärme abzuführen, ist zwar ein Wärmespreizer an der Oberfläche des Halbleiterchips angebracht, mit dem sich der thermische Widerstand eines

⁴Die experimentelle Untersuchung ist von T. Ackemann und W. Zhang (University of Strathclyde, Glasgow, UK) durchgeführt worden.

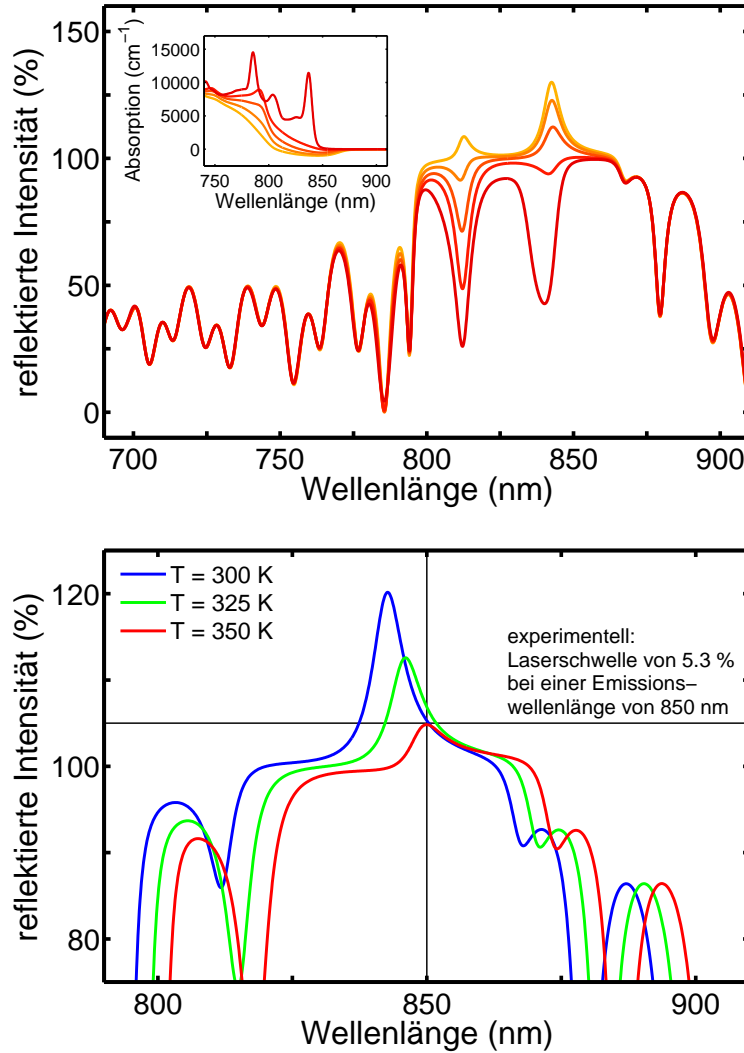


Abbildung 3.6.: (oben) Reflektivitätsspektren der VECSEL-Struktur bei einer Temperatur von 300 K für fünf verschiedene Anregungsstufen. Die zugrunde liegenden Absorptionsspektren für den 10 nm breiten $(\text{Al}_{0.108}\text{Ga}_{0.785}\text{In}_{0.107})\text{As}/(\text{Al}_{0.26}\text{Ga}_{0.74})\text{As}$ -Quantenfilm sind in der Einfügung für Ladungsträgerdichten von 0.002 , 2 , 3 , 4 und $5 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ (von rot nach gelb) bei einer inhomogenen Verbreiterung von 8 meV dargestellt. (unten) Reflektivitätsspektren der VECSEL-Struktur für eine Ladungsträgerdichte von $3.7 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ pro Quantenfilm bei einer Temperatur von 300 K (blaue Linie), 325 K (grüne Linie) und 350 K (rote Linie). Im Experiment von T. Ackemann und W. Zhang (University of Strathclyde, Glasgow, UK) wurde Lasertätigkeit bei einer Wellenlänge von 850 nm beobachtet. Die Laserschwelle liegt bei 5.3 %.

VECSEL-Systeme prinzipiell reduzieren lässt [67], dennoch verbleibt eine Restwärme im aktiven Bereich der Struktur, die die optischen Eigenschaften aufgrund der Temperaturabhängigkeit der Größen modifiziert. So bewirkt die Änderung der Brechungsindizes mit der Temperatur eine Verschiebung der Resonantorwellenlänge zu größeren Werten mit einer Verschiebungsrates von etwa 0.1 nm/K . Darüber hinaus verschiebt sich auch das Materialgewinnspektrum der Quantenfilme entsprechend der thermischen Änderung der Bandlückenenergie. Wiederholt man die

Berechnungen für eine Temperatur von 350 K anstatt 300 K, dann wird der Materialgewinn der Quantenfilme bei einer Wellenlänge von 864 nm statt bei 848 nm maximal, woraus man eine Verschiebungsrate von etwa 0.32 nm/K ableiten kann.

Das Zusammenwirken beider Aspekte, d. h. der Einfluss der Temperatur auf die Modenselektion durch den Mikroresonator und die Temperaturabhängigkeit des Materialgewinns, führt nach dem Modell eine Laserwellenlänge von 850 nm herbei, wenn man eine Temperatur von 350 K im aktiven Bereich des VECSEL-Systems annimmt (Abb. 3.6 (unten), rote Linie). Dieser Wert fällt gerade mit der Emissionswellenlänge zusammen, die experimentell beobachtet wurde. Somit kann man unter den vorliegenden Betriebsbedingungen auf eine Temperaturerhöhung von 50 K im aktiven Bereich schließen, was im Einklang mit Literaturwerten steht [68].

Neben der spektralen Verschiebung der Laserwellenlänge führt das Aufheizen des aktiven Bereichs im Laserbetrieb bei konstanter Anregung auch zu einer Reduktion der Lichtverstärkung (Abb. 3.6 (unten)). Dieses Verhalten liegt zum einen darin begründet, dass die Amplitude des Materialgewinns, den die Quantenfilme bereit stellen, mit zunehmender Temperatur sinkt. Bei einer Temperatur von 350 K ist die Amplitude im Vergleich zu dem Ergebnis bei 300 K bereits um die Hälfte abgefallen, da sich die Verteilungsfunktionen für die Ladungsträger und damit die Materialgewinnspektren entsprechend verbreitern. Zum anderen fallen die Verschiebungsraten für das Materialgewinnspektrum der Quantenfilme (≈ 0.32 nm/K) und die Resonanz der Struktur (≈ 0.1 nm/K) unterschiedlich aus. Bei einer Temperatur von 300 K selektiert die dielektrische Struktur gerade eine Wellenlänge im Maximum des Materialgewinnspektrums, hingegen ist der resonante Materialgewinn bei 350 K deutlich reduziert, weil sich in dieser Situation das Maximum des Materialgewinns bereits aus der Resonanz der Struktur zu größeren Wellenlängen hinaus bewegt hat. Die Verbreiterung des Materialgewinns mit zunehmender Temperatur und die unterschiedlichen Koeffizienten, mit denen sich die Resonatorwellenlänge und die Gewinnspektren bei einer Temperaturerhöhung verschieben, reduzieren die optische Verstärkung im vorliegenden System etwa zu gleichen Teilen.

Wenn sich die Halbleiterstruktur im Laserbetrieb aufheizt, müssen insgesamt also höhere Ladungsträgerdichten generiert werden, um eine bestimmte Lichtverstärkung aufrecht zu erhalten. Bei einer Temperatur von 350 K ist eine Ladungsträgerdichte von $3.7 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ pro Quantenfilm erforderlich, damit eine Verstärkung von 5.3 % erzielt werden kann. Dieser Verstärkungswert gleicht gerade die optischen Verluste aus, die durch das Experiment vorgegeben sind⁵. Sie setzen sich aus Auskoppelverlusten, die durch das Reflexionsvermögen des eingesetzten externen Spiegels festgelegt sind, und internen Verlusten des Lasers zusammen. Sobald man die Schwelle von 5.3 % erreicht, wird die Laserbedingung für das System erfüllt und der Laserbetrieb wird aufgenommen.

⁵Der Wert ist von T. Ackemann und W. Zhang (University of Strathclyde, Glasgow, UK) abgeschätzt worden.

3.4.2. Ladungsträgerverluste

Der optischen Verstärkung stehen verschiedene Verlustmechanismen gegenüber, die die Ladungsträgerdichte in den Quantenfilmen abbauen. Zu den fundamentalen Rekombinationsprozessen zählen die spontane Emission und die Auger-Rekombination. Aufgrund der hohen Probenqualität der VECSEL-Struktur wird die Ladungsträgerrekombination an Defekten in der Analyse zunächst vernachlässigt.

Die Verlustrate durch spontane Emission und Auger-Rekombination wird für einen $(\text{Al}_{0.108}\text{Ga}_{0.785}\text{In}_{0.107})\text{As}$ -Quantenfilm mit $(\text{Al}_{0.26}\text{Ga}_{0.74})\text{As}$ -Barrieren auf der Basis der mikroskopischen Gleichungen (Kapitel 2.4.1 und Kapitel 2.4.2) bei einer Temperatur von 350 K berechnet. Die Laserschwelle setzt nach Kapitel 3.4.1 eine Ladungsträgerdichte von $3.7 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ pro Quantenfilm voraus, womit sich für die strahlenden Verluste eine Rate r_{SE} von $2.56 \cdot 10^8 \text{ s}^{-1}$ ergibt. Im Vergleich dazu fallen die Auger-Verluste an der Schwelle mit einer Rate r_{Auger} von $0.14 \cdot 10^8 \text{ s}^{-1}$ fast um einen Faktor 20 kleiner aus.

Abb. 3.7 zeigt, dass die Ergebnisse wesentlich von der angenommenen Ladungsträgerdichte abhängen. In der halb-logarithmischen Darstellung sind die Verluste $r_{\text{SE}} N$ und $r_{\text{Auger}} N$ als Funktion der Ladungsträgerdichte N aufgetragen, die den Berechnungen jeweils zugrunde liegt. Eingezeichnet ist auch eine quadratische und eine kubische Dichteabhängigkeit, mit der die strahlenden und die Auger-Verluste häufig beschrieben werden. Die Funktionen sind jeweils an die mikroskopisch berechneten Werte im Bereich niedriger Ladungsträgerdichten angepasst, in dem die Besetzungen durch Maxwell-Boltzmann-Verteilungen beschrieben werden können. Unter diesen Voraussetzungen lässt sich für die strahlende Rekombination, ein Zwei-Teilchen-Prozess, gerade eine quadratische Dichteabhängigkeit ableiten, hingegen ergibt sich für die Auger-Rekombination, ein Drei-Teilchen-Prozess, eine kubische Dichteabhängigkeit [69]. Mit zunehmender Ladungsträgerdichte überschätzt die klassische Parametrisierung die mikroskopischen Prozesse jedoch, weil Phasenraumfülleffekte zum Tragen kommen. An der Laserschwelle des VECSEL-Systems beträgt die Abweichung der phänomenologischen Formeln von den mikroskopischen Ergebnissen bereits 50 % für die strahlenden und 20 % für die Auger-Verluste. Die Unzulänglichkeit der klassischen Beschreibung zeigt sich noch deutlicher in der mikroskopischen Analyse der Ladungsträgerverluste anderer Materialsysteme wie beispielsweise in $(\text{GaIn})(\text{AsP})$ -basierten [70] oder $(\text{AlGaIn})(\text{AsSb})$ -basierten (Kapitel 4.4.1) Laserstrukturen.

Die Berechnungen sind bei einer Temperatur von 350 K durchgeführt worden, da sich der aktive Bereich des VECSEL-Systems an der Laserschwelle in diesem Umfang aufheizt (Kapitel 3.4.1). Im Vergleich zu der Verlustrate, die man für die gleichen Ladungsträgerdichten bei einer Temperatur von 300 K erhält, fällt das Gesamtergebnis bei der erhöhten Temperatur kleiner aus. Zwar nimmt die Auger-Rate mit der Temperatur zu, aber relevant für das System sind vielmehr die strahlenden Verluste, deren Beitrag kleiner wird, weil sich die Ladungsträgerverteilungen mit zunehmender Temperatur verbreitern. Anzumerken ist aber, dass die erhöhte Betriebstemperatur auch größere Ladungsträgerdichten bedingt, um eine bestimmte Verstärkung erzielen zu können (Kapitel 3.4.1), womit der scheinbare Vorteil der insgesamt kleineren Ladungsträgerverluste letztendlich aufgehoben wird.

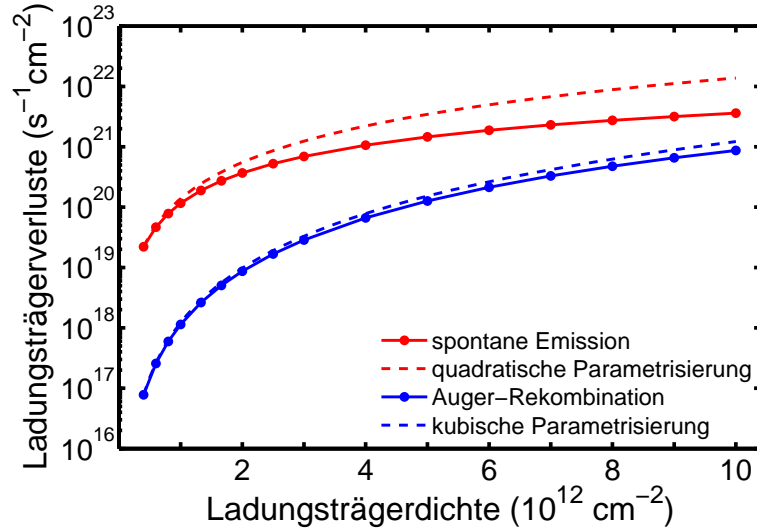


Abbildung 3.7.: Ladungsträgerverluste $r_{SE} N$ und $r_{Auger} N$ durch spontane Emission (rote Punkte) und Auger-Rekombination (blaue Punkte) als Funktion der Ladungsträgerdichte N für einen 10 nm breiten (Al_{0.108}Ga_{0.785}In_{0.107})As-Quantenfilm mit (Al_{0.26}Ga_{0.74})As-Barrieren bei einer Temperatur von 350 K. Die rot und blau gestrichelten Linien geben jeweils eine quadratische (BN^2) und eine kubische (CN^3) Abhängigkeit wieder, die klassischerweise für die strahlenden und die Auger-Verluste angenommen wird. Die Funktionen sind jeweils an die mikroskopischen Ergebnisse im Bereich niedriger Ladungsträgerdichten angepasst, in dem sie die Verluste geeignet nähern. Die Parametrisierung liefert einen B -Koeffizienten von $1.38 \cdot 10^{-4} \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}$ und einen C -Koeffizienten von $1.22 \cdot 10^{-18} \text{ cm}^4 \text{ s}^{-1}$.

3.5. Effektivität des optischen *In-Well*-Pumpens

Aus der quantitativen Berechnung der Absorptionsspektren, Verstärkungseigenschaften und Ladungsträgerverluste des VECSEL-Systems lässt sich schließlich die Pumpleistung abschätzen, die notwendig ist, um eine bestimmte Laserverstärkung zu erzielen. Dies wird einen Überblick geben, unter welchen Bedingungen das *In-Well*-Pumpschema besonders vorteilhaft ist.

Damit das System einen bestimmten Verstärkungswert aufrecht erhalten kann, müssen durch den Pumpmechanismus gerade so viele Ladungsträger erzeugt werden wie durch Rekombinationsprozesse verloren gehen. Zum Erreichen der Laserschwelle von 5.3 % muss pro Quantenfilm eine Ladungsträgerdichte von $3.7 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ zur Verfügung gestellt werden (Kapitel 3.4.1). Diese Schwellenladungsträgerdichte ist mit einer Verlustrate von insgesamt $2.7 \cdot 10^8 \text{ s}^{-1}$ pro Quantenfilm verknüpft (Kapitel 3.4.2), die durch den Pumpvorgang kompensiert werden muss. Somit lässt sich schreiben:

$$n_{qw} r_{\text{Verluste}} N = \frac{P_{\text{Pump}}}{\hbar \omega_{\text{Pump}}} I(\omega_{\text{Pump}}), \quad (3.1)$$

wobei n_{qw} die Anzahl der Quantenfilme, r_{Verluste} die Ladungsträgerverlustrate pro Quantenfilm, N die Ladungsträgerdichte pro Quantenfilm, P_{Pump} die Pumpleistung pro Fläche, $\hbar \omega_{\text{Pump}}$ die Energie des Pumplichts und $I(\omega_{\text{Pump}})$ den Anteil des Pumplichts bezeichnet, der in der Struktur insgesamt absorbiert wird. Die absorbierte Pumpintensität $I(\omega_{\text{Pump}})$ kann aus den modellierten

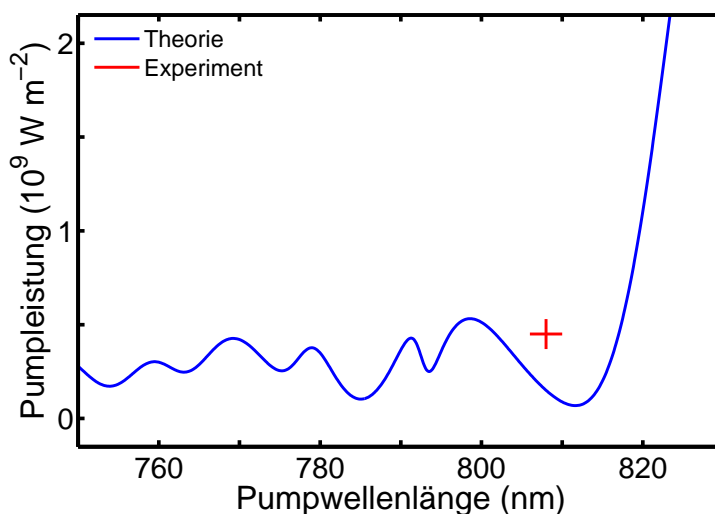


Abbildung 3.8.: Pumpleistung, die nach dem Modell zum Erreichen der Laserschwelle benötigt wird, als Funktion der Pumpwellenlänge (blaue Linie). In der Simulation ist eine Temperatur von 350 K im aktiven Bereich des VECSEL-Systems angenommen, und es wird eingerechnet, dass das Pumplicht unter einem Winkel von 27° auf die Struktur fällt. Rot markiert ist ein Messwert, der von T. Ackemann und W. Zhang (University of Strathclyde, Glasgow, UK) ermittelt wurde; um die Laserschwelle zu erreichen, musste bei einer Pumpwellenlänge zwischen 806 und 810 nm eine Pumpleistung von etwa $4,5 \cdot 10^8 \text{ W m}^{-2}$ aufgebracht werden.

Reflektivitäts- und Transmissionsspektren der VECSEL-Struktur nach Gl. 2.30 ermittelt werden und hängt wesentlich von der Wellenlänge des eingesetzten Pumplichts ab. Dabei wird eingerechnet, dass das Pumplicht unter einem Winkel von 27° auf die VECSEL-Struktur trifft.

Auf diese Weise kann die Pumpleistung an der Laserschwelle als Funktion der Pumpwellenlänge berechnet werden (Abb. 3.8, blaue Linie). Weil die Absorption des Pumplichts durch Resonanzen der dielektrischen Struktur beeinflusst wird und je nach Wellenlänge überhöht bzw. unterdrückt wird, zeigt der Verlauf der Pumpleistung eine Vielzahl lokaler Maxima und Minima. Sobald die Pumpwellenlänge aber einen Wert von 820 nm überschreitet, beobachtet man eine drastische Zunahme der erforderlichen Pumpleistung. In dieser Situation liegt die Pumpwellenlänge so dicht an der Laserwellenlänge, dass die Absorption des Pumplichts in den Quantenfilmen bereits weitgehend ausgeblichen ist, was die intrinsische Grenze für die Pumpwellenlänge festlegt. Setzt man eine Pumpquelle mit einem Wellenlängenabstand von mindestens 30 nm gegenüber der Laserwellenlänge bei 850 nm ein, bleibt aber eine ausreichend große Pumpabsorption sichergestellt.

Experimentell musste bei einer Pumpwellenlänge zwischen 806 und 810 nm eine Pumpleistung von $4,5 \cdot 10^8 \text{ W m}^{-2}$ aufgebracht werden, um die Laserschwelle zu erreichen⁶. Diese Beobachtung entspricht in etwa der theoretischen Abschätzung. Abweichungen können dadurch verursacht sein, dass in der Messung nur Teile der Fläche, die durch das Pumplicht angeregt wird, zum Laserprozess beitragen, so dass die Pumpleistung pro Fläche tatsächlich größer ist. Darüber

⁶Die experimentelle Untersuchung ist von T. Ackemann und W. Zhang (University of Strathclyde, Glasgow, UK) durchgeführt worden.

hinaus setzt die Simulation für alle Quantenfilme identische Ladungsträgerdichten voraus. In der realen Struktur werden die Ladungsträgerdichten in den einzelnen Quantenfilmen aber unterschiedlich ausfallen, da der Überlapp von Stehwellenfeld und Quantenfilmen für das Pumplicht nicht optimal ist und die inhomogene Absorption zu ungleichen Verteilungen der Ladungsträger auf die Quantenfilme führt. Weiterhin ist anzumerken, dass im Modell Ladungsträgerverluste durch Defekte in der Struktur vernachlässigt worden sind, die eine erhöhte Pumpleistung des Experiments gegenüber der Berechnung erklären können.

Diskussion der Ergebnisse

Die optischen Eigenschaften eines (AlGaIn)As-basierten VECSEL-Systems, das bei einer Wellenlänge von 850 nm emittiert, wurden im Rahmen des mikroskopischen Modells untersucht, das quantitative Vorhersagen des Laserverhaltens erlaubt. Auf diese Weise kann das komplexe Zusammenspiel von Eigenschaften des Mikroresonators und Materialeigenschaften der aktiven Quantenfilme detailliert analysiert werden.

Charakteristika des Lasersystems wie die Emissionswellenlänge oder das Schwellenverhalten werden wesentlich von der spektralen Position der Absorption bzw. des Materialgewinns, deren Amplitude sowie der Temperatur- und Dichteabhängigkeit aller Größen bestimmt. Diese Zusammenhänge sind im mikroskopischen Modell explizit berücksichtigt, so dass man aus den Ergebnissen insbesondere die Ladungsträgerdichte an der Laserschwelle ermitteln kann. Eine präzise Bestimmung ihres Wertes ist fundamental, da sich ein Fehler in der Schwellenladungsträgerdichte bei der Bewertung der zugehörigen Verluste durch spontane Emission und Auger-Rekombination, die maßgeblich von der angenommenen Ladungsträgerdichte abhängen, weiter verstärkt.

Mit Hilfe der mikroskopischen Theorie lassen sich die verschiedenen Aspekte quantitativ modellieren, so dass eine eingehende Charakterisierung des VECSEL-Systems gelingt. Im Rahmen der Analyse kann das Potential des optischen *In-Well*-Pumpens für das (AlGaIn)As-basierte VECSEL-System an der Laserschwelle eingeschätzt und mögliche Einschränkungen können aufgezeigt werden, wobei die Effektivität der Pumpabsorption im Zentrum der Untersuchung steht. Folglich sollten Pump- und Laserwellenlänge voneinander einen Abstand von mindestens 30 nm haben, damit die Pumpleistung effizient in Laserleistung umgesetzt werden kann. Für Pumpwellenlängen, die dichter an der Laserwellenlänge liegen, ist der Pumpmechanismus an der Laserschwelle stark limitiert, da die Quantenfilmabsorption in diesem Bereich bereits ausgeblieben ist.

Laserdioden mit Wellenlängen von 800 bis 810 nm, die sich aufgrund ihrer hohen Ausgangsleistungen als Pumpquellen empfehlen, eignen sich also, das bei 850 nm emittierende VECSEL-System zu pumpen, ohne dass Sättigungseffekte die Effizienz stark beeinträchtigen. Grundsätzlich wird sich die Leistung des VECSEL-Systems steigern lassen, wenn man den Aufbau der Schichtstruktur in Hinblick auf das *In-Well*-Pumpen weiterentwickelt und optimiert. Eine zentrale Aufgabe besteht darin, die Absorption des Pumplichts durch die Quantenfilme zu erhöhen. Zum einen kann man den Überlapp von Stehwellenfeld und Quantenfilmen für das Pumplicht verbessern, indem man die Platzierung der Quantenfilme in der Struktur nicht nur auf die La-

serwellenlänge, sondern auch auf die Pumpwellenlänge abstimmt. Mit einem entsprechenden Arrangement der aktiven Schichten in geeigneten Gruppen kann das Pumplicht in diesen dann resonant absorbiert werden, was die Effektivität steigern wird. Eine weitere Verbesserung wird eine Erhöhung der Quantenfilmanzahl bringen, so dass insgesamt ein größerer Anteil des Pumplichts absorbiert wird. Zwar steigt mit der Anzahl der Quantenfilme auch die Laserschwelle, da mehr Quantenfilme gepumpt werden müssen, aber andererseits kann die Ladungsträgerdichte pro Quantenfilm niedriger gehalten werden, weil jeder Quantenfilm nur einen kleinen Beitrag zur optischen Verstärkung beisteuern muss. Dies reduziert zum einen die Ladungsträgerverluste, und zum anderen wird die Sättigung der Pumpabsorption verringert. Systematische Untersuchungen, die diese Aspekte aufgreifen, sind geplant.

Darüber hinaus sollen die Ergebnisse, die mit der mikroskopischen Analyse des (AlGaIn)As-basierten VECSEL-Systems gewonnen wurden, eingesetzt werden, um die Leistungscharakteristik des VECSEL-Systems zu studieren. Die Laserausgangsleistung kann in dynamischen Lasersimulationen auf der Basis der Maxwell-Halbleiter-Bloch-Gleichungen [71] als Funktion der Pumpleistung bestimmt werden, wobei die eingehenden Streuraten und Dephasierungszeiten aus den durchgeführten mikroskopischen Berechnungen abgeleitet werden. Mit dem dynamischen Lasermode ll lassen sich insbesondere auch Auswirkungen eines Nichtgleichgewichts in der Ladungsträgerverteilung auf die Leistungscharakteristik untersuchen, das bei hohen Pumpintensitäten relevant wird [72]. Solche Studien können auf das reale (AlGaIn)As-basierte VECSEL-System übertragen und einbezogen werden, um eine an das *In-Well*-Pumpschema angepasste Struktur zu entwickeln.

Grundsätzlich lässt sich im Rahmen der mikroskopischen Theorie auch untersuchen, inwieweit VECSEL-Systeme in anderen Wellenlängenbereichen von einem optischen *In-Well*-Pumpkonzept profitieren könnten.

4. (AlGaIn)(AsSb)-basierte Laserstrukturen

In diesem Kapitel geht es um Laserstrukturen, die in dem bislang wenig untersuchten (AlGaIn)(AsSb)-Materialsystem realisiert worden sind. Mit ihnen lassen sich Emissionswellenlängen im spektralen Bereich um $2\text{ }\mu\text{m}$ erzielen.

Nach einer kurzen Einführung (Kapitel 4.1) werden Methoden zur Charakterisierung des Materialsystems vorgestellt (Kapitel 4.2). Modelliert werden insbesondere photomodulierte Reflektivitätsspektren einer Probenserie, so dass durch einen Vergleich mit experimentellen Ergebnissen Rückschlüsse auf kritische Bandstrukturparameter gezogen werden können. Mit den festgelegten Parametern werden dann Simulationen durchgeführt, um die optischen Verstärkungseigenschaften (Kapitel 4.3) und die Laserverlustprozesse (Kapitel 4.4) spezifischer Strukturen mikroskopisch zu analysieren. Auf dieser Grundlage lassen sich schließlich optimierte Laserdesigns entwickeln, deren Potential in Hinblick auf Anwendungen eingeschätzt und bewertet werden kann (Kapitel 4.5).

4.1. Einführung in das Materialsystem

Auf der Basis des (AlGaIn)(AsSb)-Materialsystems sind eine Vielzahl von Laserstrukturen mit Emissionswellenlängen von 1.8 bis $4\text{ }\mu\text{m}$ vorgestellt worden, die Diodenlaser und optisch gepumpte VECSEL-Systeme einschließen [73, 74, 75, 76, 77]. Praktische Anwendung finden sie in der optischen Freistrahldatenübertragung, der Materialbearbeitung und der Laserchirurgie [78, 79]. In der medizinischen Diagnostik können die Lasersysteme zur nicht-invasiven Bestimmung des Blutzuckerspiegels eingesetzt werden [80], da Wasser und damit die Haut bei einer Wellenlänge von $2.2\text{ }\mu\text{m}$ transparent sind, wohingegen die Absorption von Glukose eine charakteristische Resonanz zeigt. Weitere Applikationen sind die Gasspektroskopie für die Spurengas- und Umweltanalytik, da sich eine Vielzahl relevanter Gase über charakteristische Absorptionslinien im infraroten Wellenlängenbereich identifizieren lassen [81].

Trotz der vielfältigen potentiellen Anwendungsfelder existieren bislang nur wenige Untersuchungen zu fundamentalen optoelektronischen Eigenschaften von (AlGaIn)(AsSb)-basierten Laserstrukturen [82, 83, 84, 85]. Berechnungen zur optischen Verstärkung beschränken sich auf ein Einteilchenmodell [86], das keine quantitativen Analysen zulässt. Im Rahmen dieser Arbeit wird das (AlGaIn)(AsSb)-Materialsystem mit Methoden der mikroskopischen Theorie beschrieben, so

dass ein Verständnis für die Strukturen und die dort stattfindenden Prozesse entwickelt werden kann.

Bei der Simulation (AlGaIn)(AsSb)-basierter Heterostrukturen kann die $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Matrix, die zur Beschreibung der Bandstruktur eingesetzt wird (Kapitel 2.1.2), eine anomale Bandkrümmung im Bereich hoher Wellenvektoren verursachen. So zeigen sich Leitungssubbbänder, die bei hohen Wellenvektoren von einer positiven in eine unphysikalische, negative Krümmung übergehen, was insbesondere zu fehlerhaften Ladungsträgerverteilungen in den Simulationen führt. Als Eigenfunktionen ergeben sich teilweise Scheinlösungen (engl.: *spurious solutions*) [87]. Das anomale Verhalten kann letztendlich auf eine Überschätzung der Kopplung von Leitungs- und Valenzbändern zurückgeführt werden, die bei Materialien mit einer kleinen Bandlücke, d. h. typischen (AlGaIn)(AsSb)-Verbindungen, kritisch wird. Die Problematik lässt sich durch die Einführung eines zusätzlichen Terms in den Leitungsbandeinträgen der $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Matrix verhindern, der proportional zur vierten Potenz des Wellenvektors angesetzt wird und einen monotonen Verlauf der leitungsbandartigen Subbbänder sicherstellt [88]. Mit einer solchen Erweiterung erhält man schließlich eine Energiedispersion, deren Subbbänder im Zentrum der Brillouin-Zone unverändert bleiben, die unphysikalische Bandkrümmung bei hohen Wellenvektoren wird hingegen unterdrückt. Dieser Ansatz schafft schließlich geeignete Voraussetzungen, um (AlGaIn)(AsSb)-basierte Strukturen im Rahmen des mikroskopischen Modells zu beschreiben.

4.2. Optische Charakterisierung

Um das (AlGaIn)(AsSb)-Materialsystem zu charakterisieren und offene Strukturparameter festzulegen, werden Quantenfilmstrukturen entworfen und spektroskopisch untersucht. Neben der Photolumineszenz wird eine mikroskopische Analyse photomodulierter Reflektivitätsspektren vorgestellt, die eine eingehende Charakterisierung der Quantenfilmstrukturen ermöglicht.

4.2.1. Entwurf von Quantenfilmstrukturen

Lasersysteme mit Emissionswellenlängen um $2\ \mu\text{m}$ lassen sich mit Quantenfilmen aus (GaIn)Sb realisieren. Die genaue Einstellung der Emissionswellenlänge kann dabei über den Indiumgehalt und die Breite des Quantenfilms vorgenommen werden.

Entworfen werden verschiedene Quantenfilme, die im aktiven Bereich eines Lasersystems auf GaSb-Basis verwendet werden können. Die Strukturen bestehen aus einem kompressiv verspannten $(\text{Ga}_{1-x}\text{In}_x)\text{Sb}$ -Quantenfilm mit $(\text{Al}_{0.30}\text{Ga}_{0.70})\text{Sb}$ -Barrieren, die pseudomorph auf GaSb aufwachsen. Um den Einfluss der chemischen Zusammensetzung und der Breite des Quantenfilms auf das Emissionsverhalten zu studieren, werden für verschiedene Spezifikationen Photolumineszenzspektren mit Hilfe der Halbleiter-Lumineszenz-Gleichungen (Kapitel 2.3.1) bei einer Temperatur von 300 K berechnet. Die Indiumkonzentration x und die Breite des Quantenfilms b der Strukturen ist dabei so gewählt, dass Emissionswellenlängen in einem Bereich von 1.8 bis

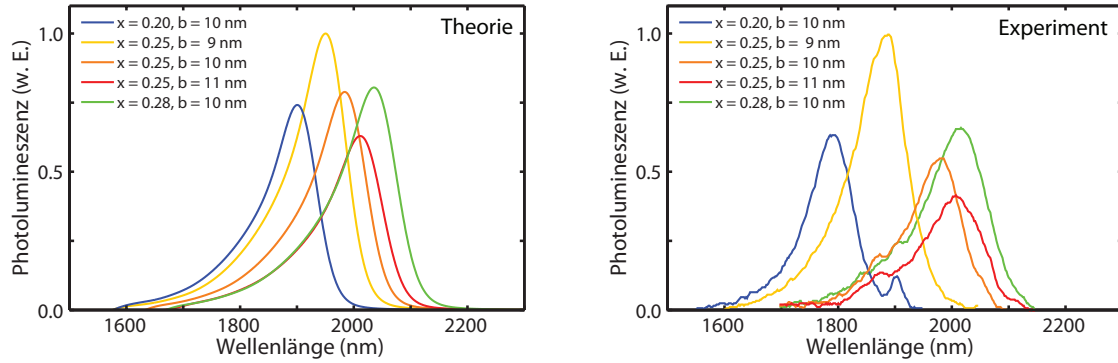


Abbildung 4.1.: (links) Modellierte Photolumineszenzspektren von fünf verschiedenen $(\text{Ga}_{1-x}\text{In}_x)\text{Sb}$ -Quantenfilmstrukturen, die für spezifische Emissionswellenlängen vorgesehen sind. Die Strukturen unterscheiden sich im Indiumgehalt x und in der Breite b des Quantenfilms, wobei zwischen $x = 20, 25$ und 28% und $b = 9, 10$ und 11 nm variiert wird. Als Barrierenmaterial wird jeweils $(\text{Al}_{0.30}\text{Ga}_{0.70})\text{Sb}$ gewählt. Den Berechnungen liegt eine Temperatur von 300 K , eine Ladungsträgerdichte von $2 \cdot 10^{11}\text{ cm}^{-2}$ und eine inhomogene Verbreiterung von 15 meV zugrunde. (rechts) Gemessene Photolumineszenzspektren verschiedener Proben bei einer Temperatur von 300 K . Die Proben enthalten nominell vier Quantenfilme mit $x = 20\%$ und $b = 10\text{ nm}$ (Probe L7-24), mit $x = 25\%$ und $b = 9\text{ nm}$ (Probe L7-153), mit $x = 25\%$ und $b = 10\text{ nm}$ (Probe L7-156), mit $x = 25\%$ und $b = 11\text{ nm}$ (Probe L7-157) und mit $x = 28\%$ und $b = 10\text{ nm}$ (Probe L7-268). Die experimentelle Untersuchung ist von G. Balakrishnan, T. J. Rotter und D. L. Huffaker (University of New Mexico, Albuquerque, USA) durchgeführt worden.

$2.1\text{ }\mu\text{m}$ erzielt werden (Abb. 4.1 (links)). Offensichtlich erhöht sich mit zunehmendem Indiumgehalt die Wellenlänge und die Intensität der Emission. Auch eine Vergrößerung der Quantenfilmbreite führt zu einer Rotverschiebung der Emissionswellenlänge, allerdings wird bei dieser Variation gleichzeitig die Intensität der Emission beeinträchtigt.

Die aus der Theorie abgeleiteten Vorhersagen werden mit experimentellen Photolumineszenzuntersuchungen¹ verglichen (Abb. 4.1 (rechts)). Den Messungen liegen Proben zugrunde, die nach den vorgeschlagenen Designs hergestellt worden sind². Entsprechend enthalten die Strukturen jeweils vier $(\text{Ga}_{1-x}\text{In}_x)\text{Sb}$ -Quantenfilme, deren Indiumgehalt und Breite in den unterschiedlichen Proben variiert wird. Die Quantenfilme sind durch $(\text{Al}_{0.30}\text{Ga}_{0.70})\text{Sb}$ -Barrierenschichten mit einer Breite von 20 nm getrennt, so dass eine Kopplung der elektronischen Wellenfunktionen benachbarter Quantenfilme vermieden wird. Der Quantenfilmbereich wird von 100 nm breiten $(\text{Al}_{0.30}\text{Ga}_{0.70})\text{Sb}$ -Schichten umschlossen, an die jeweils 50 nm breite AlSb -Schichten anschließen, die sich durch eine größere Bandlücke auszeichnen und somit die Ladungsträger im aktiven Bereich einschließen. Abgedeckt wird die Struktur durch eine 10 nm breite GaSb -Schicht. Die Strukturen sind auf GaSb -Substraten bzw. auf GaAs -Substraten mit einer so genannten IMF-Schicht [89] (engl.: *interfacial misfit array*) aufgewachsen, wobei zwischen dem Substrat bzw. der IMF-Schicht und dem aktiven Bereich eine 500 nm breite GaSb -Pufferschicht eingebracht

¹Die Photolumineszenzspektren sind experimentell von G. Balakrishnan, T. J. Rotter und D. L. Huffaker (University of New Mexico, Albuquerque, USA) aufgenommen worden.

²Die Proben sind von G. Balakrishnan, T. J. Rotter und D. L. Huffaker (University of New Mexico, Albuquerque, USA) mittels Molekularstrahlepitaxie hergestellt worden.

ist.

Im Experiment beobachtet man Maxima der Photolumineszenz genau bei den Wellenlängen, die mit dem mikroskopischen Modell für die verschiedenen Strukturen vorhergesagt worden sind. Die Übereinstimmung der gemessenen und berechneten Emissionswellenlängen bestätigt die verwendeten Bandstrukturparameter für das Materialsystem, insbesondere wird die Interpolation der Bandlücke mit einem (GaIn)Sb-Biegeparameter von 0.415 eV [15] verifiziert, die in das Modell eingeht. Darüber hinaus zeigt das Experiment ähnliche Trends der Photolumineszenzintensität bei variierender Materialzusammensetzung und Quantenfilmbreite. Beispielsweise emittiert die Probe mit den 11 nm breiten $(\text{Ga}_{0.75}\text{In}_{0.25})\text{Sb}$ -Quantenfilmen bei einer Wellenlänge von $2\text{ }\mu\text{m}$ mit einer Intensität, die im Vergleich zu den Proben mit den dünneren $(\text{Ga}_{0.75}\text{In}_{0.25})\text{Sb}$ -Quantenfilmen reduziert ist. Eine größere Intensität bei einer Wellenlänge von $2\text{ }\mu\text{m}$ wird für einen 10 nm breiten Quantenfilm mit einer Indiumkonzentration von 28 % festgestellt. Dieses Verhalten stimmt also mit den mikroskopischen Simulationen überein.

4.2.2. Methode der photomodulierten Reflexion

Zur Untersuchung der vorgestellten (GaIn)Sb-Quantenfilmstrukturen wird die Methode der photomodulierten Reflexion (PR) gewählt. Im Gegensatz zu den Photolumineszenzspektren, die unter typischen Anregungsbedingungen nur Übergänge zwischen den tiefsten Subbändern zeigen, spiegeln PR-Spektren eine Vielzahl von Interbandübergängen und ihre zugehörigen Oszillatorstärken wider. Damit eignet sich die Methode besonders für die Charakterisierung von Quantenfilmstrukturen.

Das Prinzip der Modulationsspektroskopie beruht darauf, die Energien und Oszillatorstärken der Interbandübergänge zu modulieren und die dadurch induzierte Änderung der optischen Antwort des Systems zu bestimmen. Auf diese Weise zeigen die Signaturen des resultierenden differentiellen Spektrums sensitiv die kritischen Punkte der optischen Suszeptibilität an. Als Modulationstechnik eignet sich z. B. die periodische Variation der Temperatur, des Drucks, des internen elektrischen Feldes oder der Anregungsintensität [5].

Bei der PR wird die Änderung des Reflexionsvermögens ermittelt, die durch eine optische Anregung induziert wird [90, 91, 92]. Experimentell wird die Anregung realisiert, indem Licht einer geeigneten Laserdiode auf die Probenstruktur fokussiert wird, so dass in den Halbleiterschichten Ladungsträger erzeugt werden. Durch eine Modulation der Anregungsintensität lässt sich die Ladungsträgerdichte dann zwischen (nahezu) 0 und einem bestimmten Wert variieren. Der Mechanismus, der zu der anregungsinduzierten Änderung der Reflektivität führt, wird in der Literatur diskutiert [90, 91, 93, 94, 95], denn eine Variation der Anregungsintensität wirkt sich auf die optische Suszeptibilität der Quantenfilmstruktur in zweierlei Hinsicht aus: Zum einen streuen die induzierten Ladungsträger in die Quantenfilme, deren optische Antwort mit der zunehmenden Besetzung entsprechend modifiziert wird. Zum anderen schirmen die induzierten Ladungsträger statische elektrische Felder, die innerhalb der Probenstruktur vorliegen können, ab. Dies führt zu einem modifizierten Bandkantenverlauf und zu veränderten Eigenzuständen und -energien, was

wiederum die optische Antwort des Quantenfilms beeinflusst.

Da die vorliegenden Quantenfilmstrukturen nominell keine Dotierungen aufweisen und folglich keine signifikanten internen elektrischen Felder zu erwarten sind, sollte das PR-Signal der Proben nicht durch eine Feldmodulation, sondern vielmehr durch eine Modulation der Ladungsträgerdichte im Quantenfilm zustande kommen. Unterstützt wird diese Annahme durch die Ergebnisse einer mikroskopischen Analyse von (GaIn)As-Quantenfilmstrukturen [96]. Aus diesem Grund wird den PR-Simulationen der (GaIn)Sb-Systeme zunächst eine Modulation der Ladungsträgerdichte im Quantenfilm zugrunde gelegt.

Um ein PR-Spektrum zu modellieren, wird im ersten Schritt die optische Suszeptibilität der Quantenfilmschicht für zwei unterschiedliche Ladungsträgerdichten berechnet, indem jeweils die Halbleiter-Bloch-Gleichungen im Quasigleichgewicht gelöst werden (Kapitel 2.2.1). Exemplarisch werden Simulationen für einen 11 nm breiten $(\text{Ga}_{0.75}\text{In}_{0.25})\text{Sb}$ -Quantenfilm mit $(\text{Al}_{0.30}\text{Ga}_{0.70})\text{Sb}$ -Barrieren bei einer Temperatur von 300 K vorgestellt. Das resultierende Spektrum ist in Abb. 4.2 (a) dargestellt und zeigt vier exzitonische Signaturen, die optisch starke Interbandübergänge charakterisieren. Wenn man vom Fall niedriger Ladungsträgerdichte (blaue Linie) zu einer optischen Anregung (rote Linie) übergeht, verändert sich die Linienform des Spektrums im gesamten betrachteten Energiebereich, da eine Variation der Ladungsträgerdichte den Phasenraumfüllfaktor, die Abschirmung und die Renormierung der Bandlücke modifiziert.

Mit der mikroskopisch berechneten Suszeptibilität kann schließlich die Brechungsindexdispersion $n(\omega)$ des Quantenfilms nach Gl. 2.20 ausgewertet werden. Die optisch starken Interbandübergänge verursachen charakteristische Brechungsindexänderungen (Abb. 4.2 (b)) und werden somit auch im Reflektivitätsspektrum $R(\omega)$ der Quantenfilm-Barrieren-Grenzfläche widergespiegelt (Abb. 4.2 (c)). Zur Berechnung des Reflektivitätsspektrums ist die Fresnel-Formel [97]

$$R(\omega) = 1 - \frac{4 n_B n(\omega)}{(n_B + n(\omega))^2} \quad (4.1)$$

angewendet worden, wobei die Barrierenschicht durch einen konstanten Brechungsindex n_B von 3.62 [98] beschrieben wird. Das PR-Spektrum erhält man, indem man das Reflektivitätsspektrum in der Anregungssituation (R_x) vom Reflektivitätsspektrum im Fall niedriger Ladungsträgerdichte (R_0) subtrahiert:

$$PR(\omega) = \frac{2 (R_0(\omega) - R_x(\omega))}{R_0(\omega) + R_x(\omega)}. \quad (4.2)$$

Das resultierende Spektrum ist in Abb. 4.2 (d) dargestellt und zeigt, wie der Untergrund der Kontinuumsbeiträge durch die Bildung des differentiellen Spektrums unterdrückt wird. Hingegen werden die exzitonischen Beiträge in Form von charakteristischen Signalen betont.

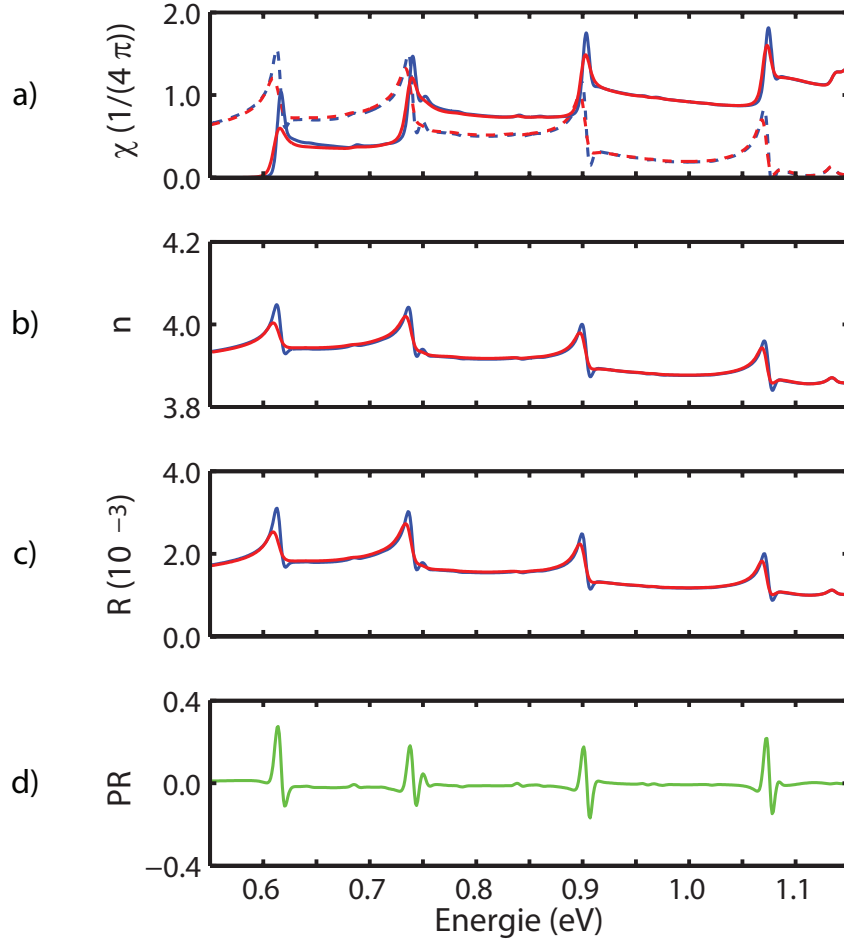


Abbildung 4.2.: Simulation der photomodulierten Reflexion. (a) Imaginärteil (durchgezogene Linien) und Realteil (gestrichelte Linien) der optischen Suszeptibilität χ eines 11 nm breiten $(\text{Ga}_{0.75}\text{In}_{0.25})\text{Sb}$ -Quantenfilms mit $(\text{Al}_{0.30}\text{Ga}_{0.70})\text{Sb}$ -Barrieren bei einer Temperatur von 300 K. In den Simulationen sind Ladungsträgerdichten von $2 \cdot 10^9 \text{ cm}^{-2}$ (blaue Linien) und $1 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ (rote Linien) angenommen. (b) Abgeleitete Brechungsindexdispersion n der Quantenfilmschicht für die beiden Anregungssituationen. (c) Reflektivitätsspektrum R der Quantenfilm-Barrieren-Grenzfläche. Während die Barrierenschicht durch einen konstanten Brechungsindex beschrieben wird, geht für die Quantenfilmschicht der mikroskopisch berechnete, frequenzabhängige Brechungsindex ein. Im Quantenfilm sind zum Vergleich einmal die niedrige (blaue Linie) und einmal die hohe (rote Linie) Ladungsträgerdichte eingesetzt. (d) PR-Spektrum, das man aus der Differenz der beiden Reflektivitätsspektren für die beiden Anregungssituationen erhält.

4.2.3. Vergleich theoretischer und experimenteller photomodulierter Reflektivitätsspektren

Um strukturelle Abhängigkeiten der verschiedenen optischen Interbandübergänge aufzuklären, werden die berechneten PR-Spektren der Quantenfilmstrukturen Messungen³ gegenübergestellt. Abb. 4.3 (oben) zeigt die Ergebnisse für die Struktur, die bereits in Kapitel 4.2.2 betrachtet worden ist, wobei das zugrunde liegende theoretische Spektrum (Abb. 4.2 (d)) für den Vergleich mit einer Gauß-Funktion gefaltet worden ist, um probenspezifische Unordnungseffekte einzubeziehen. Mit einer Halbwertsbreite von 15 meV können die Signaturen schließlich so verbreitert werden, dass sich ihre Linienform in etwa an das experimentelle Spektrum anpasst. Insgesamt lassen sich die prägnanten Resonanzen der Messung charakteristischen Linien des simulierten Spektrums zuordnen.

Zentral für die Untersuchung ist der Vergleich der Resonanzenergien, denn diese lassen Rückschlüsse auf strukturelle Eigenschaften des Quantenfilms zu. Eine quantitative Analyse der Linienform des Spektrums wird hingegen nicht angestrebt, da die Amplitude der PR-Signale auch vom Layout der Probenstruktur insgesamt abhängt. Den Einfluss der dielektrischen Struktur auf das Reflexionsvermögen kann man prinzipiell mit der Transfermatrixmethode (Kapitel 2.2.2) einbinden; im Vergleich zu dem Ergebnis für ein einzelnes Barriere-Quantenfilm-Schichtpaar zeigen die Resonanzen im differentiellen Spektrum dann eine leicht modifizierte Linienform, die jedoch sensitiv auf die einzelnen Brechungsindizes innerhalb der Probenstruktur reagiert. Da die relative Änderung der Reflektivität in den experimentellen Spektren mit einer Genauigkeit von 10^{-5} detektiert wird, werden sich also schon minimale Änderungen der Strukturparameter von Probenstelle zu Probenstelle auf die Signalform auswirken.

Im PR-Spektrum treten verschiedene Resonanzen hervor, die optisch starke Übergänge im Quantenfilm anzeigen. Zur Veranschaulichung ist in Abb. 4.3 (unten) das Quadrat des optischen Dipolmatrixelements für verschiedene Subbandübergänge in Abhängigkeit der Übergangsenergie am Γ -Punkt dargestellt. Obwohl die Größe des Dipolmatrixelements stark mit dem Wellenvektor variiert, gibt ein solches Stabdiagramm Hinweise darauf, welche Übergänge das Absorptionsspektrum dominieren. Da das Dipolmatrixelement proportional zum räumlichen Überlapp der beteiligten Wellenfunktionen ist, bilden sich ausgeprägte exzitonische Signaturen an den diagonalen Übergängen aus, d. h. den Übergängen zwischen dem tiefsten Elektron- und dem tiefsten Lochsubband (e1-h1), dem zweittiefsten Elektron- und dem zweittiefsten Lochsubband (e2-h2), dem dritttiefsten Elektron- und dem dritttiefsten Lochsubband (e3-h3) sowie dem vierttiefsten Elektron- und dem vierttiefsten Lochsubband (e4-h4). Bei diesen Kombinationen kann für die Wellenfunktionen der jeweils beteiligten Zustände ein großer räumlicher Überlapp gefolgert werden, der eine hohe Oszillatorstärke bewirkt. Dies führt schließlich zu den vier charakteristischen Signaturen im modellierten PR-Spektrum, die auch experimentell nachgewiesen werden. Dass sich das experimentelle Signal bei 1.08 eV so stark ausbildet, ist vermutlich auf Modulationseffekte zurückzuführen.

³Die photomodulierten Reflektivitätsspektren sind experimentell von B. Metzger, S. Chatterjee und W. W. Rühle (Philipps-Universität Marburg) aufgenommen worden. Den Messungen liegen Proben zugrunde, die von G. Balakrishnan, T. J. Rotter und D. L. Huffaker (University of New Mexico, Albuquerque, USA) hergestellt worden sind.

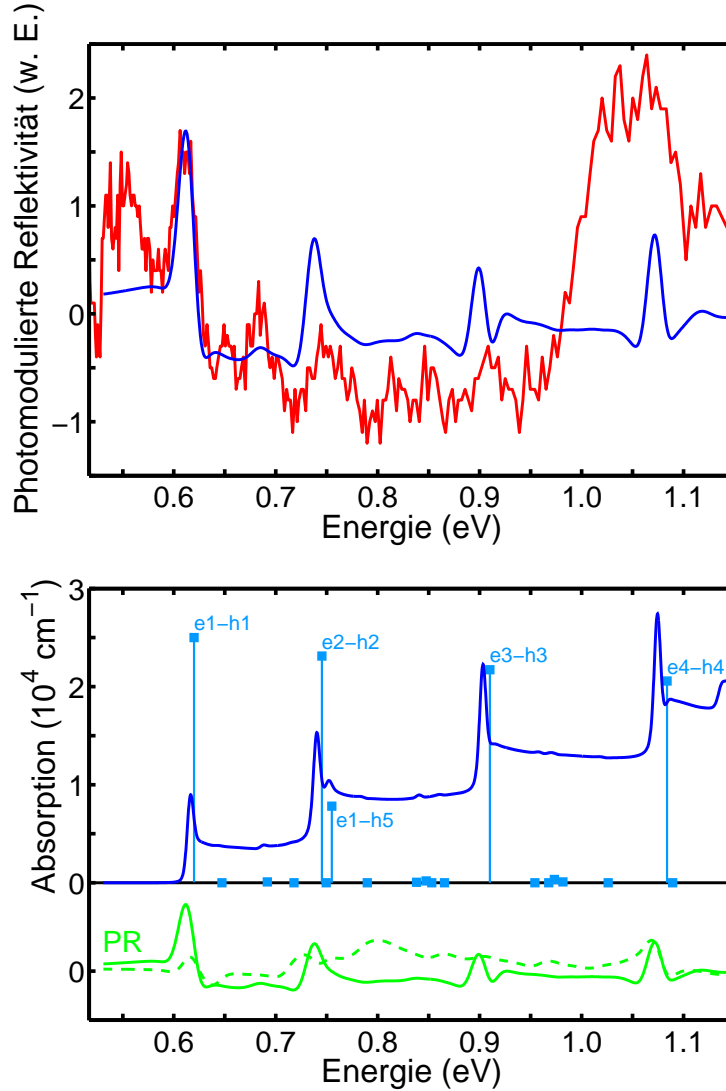


Abbildung 4.3.: (oben) Vergleich des modellierten (blaue Linie) und des gemessenen (rote Linie) PR-Spektrums der Quantenfilmstruktur (Probe L7-153) bei einer Temperatur von 300 K. Für die Simulation sind Reflektivitätsspektren eines Barrieren-Quantenfilm-Schichtpaars für zwei unterschiedliche Anregungssituationen berechnet worden. Die zugrunde liegenden Suszeptibilitätsspektren des 11 nm breiten $(\text{Ga}_{0.75}\text{In}_{0.25})\text{Sb}/(\text{Al}_{0.30}\text{Ga}_{0.70})\text{Sb}$ -Quantenfilms sind für Ladungsträgerdichten von 2 und $100 \cdot 10^9 \text{ cm}^{-2}$ ermittelt und mit 15 meV inhomogen verbreitert worden. Das Experiment ist von B. Metzger, S. Chatterjee und W. W. Rühle (Philipps-Universität Marburg) an einer von G. Balakrishnan, T. J. Rotter und D. L. Huffaker (University of New Mexico, Albuquerque, USA) hergestellten Probe durchgeführt worden. (unten) Zugrunde liegendes Absorptionsspektrum des Quantenfilms (blaue Linie). Die Balken zeigen die Oszillatorstärke (in w. E.) der verschiedenen Interbandübergänge am Γ -Punkt an. Vertikal versetzt ist das resultierende differentielle Reflektivitätsspektrum für die Dichtemodulation (grüne durchgezogene Linie) im Vergleich zu dem Ergebnis für eine Modulation eines elektrischen Feldes von 15 kV/cm (grüne gestrichelte Linie) dargestellt, um die Auswirkung der möglichen Modulationsmechanismen bei der PR aufzuzeigen.

fekte in den Barrierenschichten zurückzuführen.

Neben den vier Resonanzen, die den diagonalen Übergängen zugeordnet werden, lassen sich im experimentellen PR-Spektrum weitere Signaturen erkennen. So beobachtet man um eine Energie von 0.54 und 0.56 eV zwei Maxima, für die Interbandübergänge des Quantenfilms als Erklärung offenbar nicht zur Verfügung stehen. Ursache für die beiden Signale sind möglicherweise Defekte im Substrat, die vom GaSb-Material bekannt sind [14, 99]. Experimentell wird die Vermutung dadurch unterstützt, dass sich die beiden Maxima im PR-Spektrum einer äquivalenten Probenstruktur, die aber auf einem GaAs-Substrat mit IMF-Schicht anstatt auf einem GaSb-Substrat aufgewachsen ist, weniger stark ausbilden.

Darüber hinaus treten im experimentellen PR-Spektrum zwischen Resonanzen der diagonalen Übergänge weitere Maxima hervor, beispielsweise bei 0.652 und 0.683 eV. Zwar zeigt auch die Simulation kleinere Resonanzen bei den jeweiligen Energien, die Signaturen sind aber deutlich schwächer ausgeprägt. Bezüglich ihrer spektralen Lage können sie optisch schwachen Übergängen wie der e1-h2 und e2-h1-Resonanz zugeschrieben werden. Da die Signifikanz dieser Übergänge im Experiment offensichtlich größer ist, liegt möglicherweise ein internes elektrisches Feld in der Quantenfilmstruktur vor. Ein solches Feld verkippt den Bandkantenverlauf für die Elektronen und Löcher, so dass die ursprünglich verbotenen Übergänge an Oszillatorstärke gewinnen. Verantwortlich für den Aufbau des elektrischen Feldes können Verunreinigungen im GaSb-Substrat sein, die typischerweise zu einer leichten p-Dotierung führen [14, 99].

Um mögliche Auswirkungen eines internen elektrischen Feldes auf das PR-Spektrum einzuschätzen, wird das differentielle Spektrum der Probenstruktur im Fall einer Feldmodulation berechnet (Abb. 4.3 (unten), grüne gestrichelte Linie). Das Spektrum ergibt sich aus der Differenz der Reflektivitätsspektren für zwei unterschiedliche Feldsituationen, die sich je nach Abschirmung durch die anregungsinduzierten Ladungsträger einstellen und zum Test durch eine Modulation von 15 kV/cm wiedergegeben werden sollen. Im Vergleich zu dem PR-Spektrum, das eine Dichtevariation voraussetzt (Abb. 4.3 (unten), grüne durchgezogene Linie), zeigen sich deutliche Unterschiede, allerdings klärt sich damit offensichtlich nicht der Ursprung der experimentellen Resonanzen auf.

Abb. 4.4 zeigt den Vergleich theoretischer und experimenteller PR-Spektren für weitere Proben. Die ausgewählten Strukturen unterscheiden sich ausschließlich in ihrer Quantenfilmbreite, so dass strukturelle Abhängigkeiten systematisch untersucht werden können. Mit zunehmender Quantenfilmbreite lässt sich in den PR-Spektren eine Verschiebung der e1-h1-Resonanz zu kleineren Energien verfolgen. Noch sensibler auf die strukturellen Variationen reagieren aber die höheren Interbandübergänge des Quantenfilms; die Simulationen zeigen Verschiebungsraten von 10 meV/nm für die e1-h1-Resonanz, 30 meV/nm für die e2-h2-Resonanz und 54 meV/nm für die e3-h3-Resonanz. Experimentell kann zwar die prognostizierte Verschiebung der ersten Resonanz beobachtet werden, höhere Übergänge und deren Abhängigkeiten lassen sich in den vorliegenden PR-Messungen aber aufgrund des niedrigen Signal-Rausch-Verhältnisses nicht auflösen.

Es ist anzumerken, dass die Reflektivitätsspektren der Halbleiterstruktur für einen senkrechten Lichteinfall in Wachstumsrichtung der Struktur berechnet worden sind. Experimentell sind die

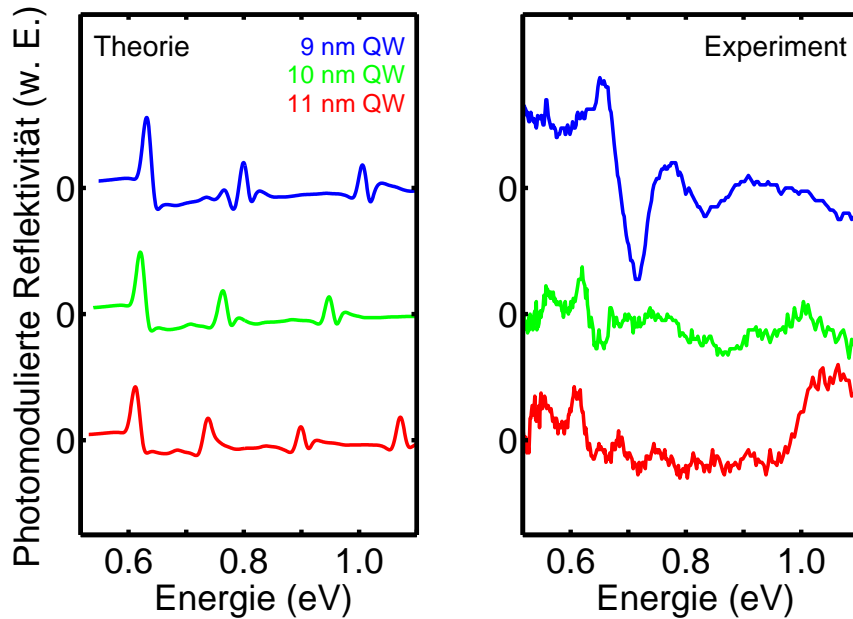


Abbildung 4.4.: Vergleich modellierter (*links*) und gemessener (*rechts*) PR-Spektren von drei Strukturen, die sich in der Breite des Quantenfilms (QW) unterscheiden, bei einer Temperatur von 300 K. Für die Simulation sind Reflektivitätsspektren eines Barrieren-Quantenfilm-Schichtpaares für zwei unterschiedliche Anregungssituationen berechnet worden. Die zugrundeliegenden Suszeptibilitätsspektren des 9, 10 bzw. 11 nm breiten $(\text{Ga}_{0.75}\text{In}_{0.25})\text{Sb}/(\text{Al}_{0.30}\text{Ga}_{0.70})\text{Sb}$ -Quantenfilms sind für Ladungsträgerdichten von 2 und $100 \cdot 10^9 \text{ cm}^{-2}$ ermittelt und mit 15 meV inhomogen verbreitert worden. Das Experiment ist von B. Metzger, S. Chatterjee und W. W. Rühle (Philipps-Universität Marburg) an von G. Balakrishnan, T. J. Rotter und D. L. Huffaker (University of New Mexico, Albuquerque, USA) hergestellten Proben durchgeführt worden. Die Ergebnisse für die verschiedenen Probenstrukturen (L7-153, L7-156, L7-157) sind vertikal versetzt dargestellt.

PR-Spektren unter einem Winkel von 45° aufgenommen worden, woraus sich mit dem Brechungsgesetz nach Snellius [97] für die Barrieren-Quantenfilm-Grenzfläche ein Einfallswinkel von 11° ableiten lässt. Berücksichtigt man den Einfallswinkel in der Berechnung und bindet dementsprechend neben den Spektren für die TE- auch die Ergebnisse für eine TM-Polarisation ein, stellt man jedoch nur minimale Abweichungen vom PR-Spektrum für den senkrechten Lichteinfall fest. Die Näherung des senkrechten Einfalls in den Simulationen ist also gerechtfertigt.

4.3. Optische Verstärkung

Auf der Basis der extrahierten Bandstrukturparameter werden optische Verstärkungsspektren einer Laserstruktur prognostiziert und mit experimentellen Ergebnissen verglichen. Neben dem direkten Vergleich von Simulation und Messung gestattet das mikroskopische Modell eine genaue Analyse der Verstärkungseigenschaften, insbesondere lässt sich der Einfluss der spezifischen Bandstruktur auf die Verstärkung untersuchen.

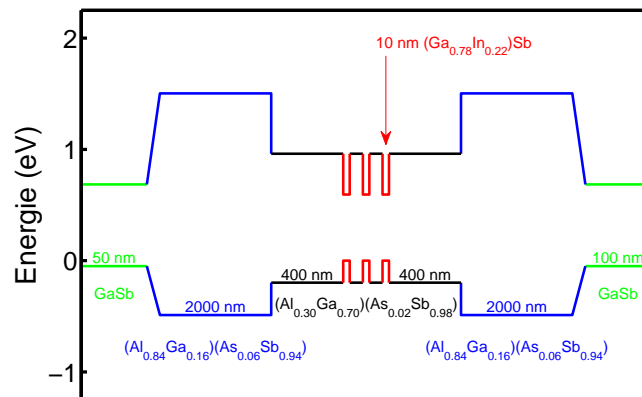


Abbildung 4.5.: Bandkantenverlauf des Leitungs- und Valenzbandes der Laserstruktur bei einer Temperatur von 280 K. Der aktive Bereich besteht aus drei $(\text{Ga}_{0.78}\text{In}_{0.22})\text{Sb}$ -Quantenfilmen, die in $(\text{Al}_{0.30}\text{Ga}_{0.70})(\text{As}_{0.02}\text{Sb}_{0.98})$ -Wellenleiterschichten eingebettet sind.

4.3.1. Vergleich theoretischer und experimenteller Verstärkungsspektren

Untersucht werden die optischen Verstärkungseigenschaften eines elektrisch gepumpten antimonidischen Diodenlasers⁴, der Licht bei einer Wellenlänge von $1.94 \mu\text{m}$ emittieren soll. Die Struktur enthält drei 10 nm breite, kompressiv gespannte $(\text{Ga}_{0.78}\text{In}_{0.22})\text{Sb}$ -Quantenfilme, die durch 20 nm breite $(\text{Al}_{0.30}\text{Ga}_{0.70})(\text{As}_{0.02}\text{Sb}_{0.98})$ -Barrierenschichten voneinander getrennt sind. Der Quantenfilmbereich ist zwischen $(\text{Al}_{0.30}\text{Ga}_{0.70})(\text{As}_{0.02}\text{Sb}_{0.98})$ -Barrierenschichten mit einer Dicke von 400 nm auf jeder Seite eingebettet, an die dotierte Mantelschichten aus $(\text{Al}_{0.84}\text{Ga}_{0.16})(\text{As}_{0.06}\text{Sb}_{0.94})$ anschließen. Sowohl das Barrieren- als auch das Mantelmaterial sind bezüglich des GaSb-Substrats gitterangepasst gewählt. Die Mantelschichten weisen aber aufgrund ihres höheren Aluminiumgehalts einen deutlich kleineren Brechungsindex auf als die Barrierenschichten, so dass wegen des großen Brechungsindexkontrastes ein Wellenleiter geformt wird, der die Lasermode innerhalb der Barrierenschichten einschließt. Der Aufbau der Laserstruktur ist in Abb. 4.5 skizziert.

Zur elektrischen Kontaktierung ist die Laserstruktur an der oberen Mantelschicht durch eine p-dotierte GaSb-Schicht abgeschlossen, hingegen ist das GaSb-Substrat und die GaSb-Pufferschicht, die zwischen dem Substrat und der unteren Mantelschicht eingebracht ist, n-dotiert. Aufgrund der Dotierungen baut sich ein statisches elektrisches Feld in Wachstumsrichtung der Struktur auf, das den Potentialverlauf für Elektronen und Löcher verkippt. Das interne elektrische Feld wird aber weitgehend kompensiert, sobald man die Struktur für den Laserbetrieb elektrisch pumpt und eine entsprechend große externe Spannung anlegt. Zudem nimmt mit der Pumpintensität die Anzahl der Ladungsträger im aktiven Bereich zu, die mögliche elektrische

⁴Die Laserstruktur ist von M. Rattunde, N. Schulz und J. Wagner (Fraunhofer-Institut für Angewandte Festkörperphysik, Freiburg) mittels Molekularstrahlepitaxie hergestellt worden.

Felder innerhalb der Struktur abschirmen. Zur Simulation der optischen Verstärkung müssen somit keine internen elektrischen Felder berücksichtigt werden, vielmehr kann ein flacher Bandkantenverlauf im Quantenfilmbereich vorausgesetzt werden.

Um die Verstärkungseigenschaften des Lasersystems zu bestimmen, wird im ersten Schritt das Spektrum des Materialgewinns eines einzelnen Quantenfilms der Laserstruktur für verschiedene Ladungsträgerdichten mit Hilfe der Halbleiter-Bloch-Gleichungen berechnet. Die optische Verstärkung, die sich durch das Lasersystem insgesamt ergibt, lässt sich dann ermitteln, indem man den Materialgewinn, der von einem Quantenfilm zur Verfügung gestellt wird, mit dem Einschlussfaktor für die Lasermode multipliziert. Der Einschlussfaktor beschreibt gerade den Überlapp der Mode mit den aktiven Schichten der Struktur, wobei die vorliegende Struktur mit den drei Quantenfilmen im Zentrum der Wellenleiterschichten einen Einschlussfaktor von 6.6 % definiert. Multipliziert man also die mikroskopisch berechneten Materialgewinnspektren mit diesem Wert, so ergibt sich der Modalgewinn der Laserstruktur (Abb. 4.6, blaue Linien), der die Verstärkung des Gesamtsystems quantifiziert. Den Simulationen liegt eine Temperatur von 280 K und eine unordnungsinduzierte inhomogene Verbreiterung mit einer Halbwertsbreite von 10 meV zugrunde.

Die berechneten Modalgewinnspektren werden mit Messungen⁵ verglichen, die ebenfalls in Abb. 4.6 eingezeichnet sind (gelbe bis rote Linien). Im Experiment sind hochaufgelöste Elektrolumineszenzspektren eines 500 μm langen und 6 μm breiten Rippenwellenleiterlasers für verschiedene Anregungsströme unterhalb der Laserschwelle aufgenommen worden, aus denen sich schließlich die Modalgewinnspektren nach der Methode von Hakki und Paoli ableiten lassen [100, 101]. Für den Vergleich mit den Simulationen werden die Messergebnisse vertikal um 50 cm^{-1} gegenüber der Nulllinie verschoben, denn im Experiment sorgen Spiegel- und interne Verluste, die die Photonendichte im Resonator abbauen, für einen solchen Versatz des Modalgewinns.

Die theoretisch und experimentell ermittelten Modalgewinnspektren stimmen weitgehend überein, was unterstreicht, dass sich das mikroskopische Modell für realistische Simulationen des (AlGaIn)(AsSb)-basierten Materialsystems eignet. Innerhalb der Streuung der experimentellen Daten gibt die Theorie sowohl die spektrale Lage als auch die Linienform der gemessenen Verstärkungsspektren wieder. Mit zunehmender Anregung wachsen die Amplitude und die spektrale Breite des Modalgewinns, gleichzeitig verschiebt sich das Maximum zu höheren Energien. Aufgrund dieser Zusammenhänge können die modellierten und gemessenen Spektren einander eindeutig zugeordnet werden, so dass man anhand der Analyse die Ladungsträgerdichte pro Quantenfilm als Funktion des Anregungsstroms extrahieren kann. Im untersuchten Bereich steigt die Ladungsträgerdichte linear mit dem Anregungsstrom (Einfügung in Abb. 4.6).

Anzumerken ist, dass die modellierten Spektren für die demonstrierte Übereinstimmung um 4 meV zu höheren Energien verschoben worden sind. Eine solche Verschiebung liegt innerhalb der Wachstumsunsicherheiten und lässt sich beispielsweise durch eine Indiumkonzentration im Quantenfilm von 21.3 anstatt 22 % oder eine Quantenfilmbreite von 9.5 anstatt 10 nm erklären.

⁵Die Modalgewinnspektren sind experimentell von M. Rattunde, N. Schulz und J. Wagner (Fraunhofer-Institut für Angewandte Festkörperphysik, Freiburg) aufgenommen worden.

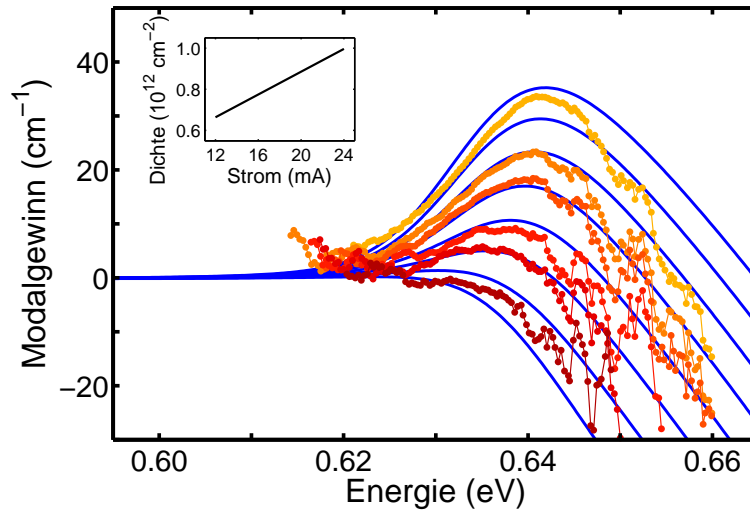


Abbildung 4.6.: Vergleich modellierter (blaue Linien) und gemessener (rote bis gelbe Linien) Modalgewinnspektren der $(\text{Ga}_{0.78}\text{In}_{0.22})\text{Sb}/(\text{Al}_{0.30}\text{Ga}_{0.70})(\text{As}_{0.02}\text{Sb}_{0.98})$ -Laserstruktur bei einer Temperatur von 280 K für verschiedene Anregungsstufen. In der Simulation sind eine unordnungsinduzierte inhomogene Verbreiterung von 10 meV und ein Einschlussfaktor der Lasermode von 6.6 % berücksichtigt. Die Spektren sind 4 meV zu höheren Energien verschoben, was auf kleine Abweichungen der tatsächlichen Strukturparameter vom nominellen Design zurückgeführt werden kann. Die angenommenen Ladungsträgerdichten pro Quantenfilm betragen $0.65, 0.7, 0.75, 0.8, 0.85, 0.9, 0.95$ und $1.0 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ (von unten nach oben). Die experimentellen Spektren sind nach der Methode von Hakki und Paoli bei Anregungsströmen von 12.7, 14.6, 16.9, 18.9, 20.8 und 22.8 mA (von rot nach gelb) ermittelt und von M. Rattunde, N. Schulz und J. Wagner (Fraunhofer-Institut für Angewandte Festkörperphysik, Freiburg) aufgenommen worden. Um die Nulllinie im niederenergetischen Bereich zu treffen, sind die Messungen vertikal um 50 cm^{-1} verschoben; dieser Versatz kommt durch die Spiegel- und die internen optischen Verluste des Lasers zustande. Die Einfügung zeigt den Zusammenhang des Anregungsstroms und der Ladungsträgerdichten pro Quantenfilm, der sich aus der Zuordnung der gemessenen Spektren zu jeweils passenden, modellierten Spektren ergibt.

4.3.2. Analyse der Verstärkungseigenschaften

Das $(\text{GaIn})\text{Sb}$ -System zeichnet sich gegenüber anderen Materialklassen durch ausgesprochen hohe optische Gewinnamplituden aus. Um den Unterschied zu illustrieren, wird der Materialgewinn einer gewöhnlichen GaAs-basierten Struktur berechnet, die aus einem 10 nm breiten $(\text{Ga}_{0.80}\text{In}_{0.20})\text{As}$ -Quantenfilm mit GaAs-Barrieren besteht. Dazu werden die entsprechenden Halbleiter-Bloch-Gleichungen analog bei einer Temperatur von 280 K gelöst. Die Ergebnisse sind in Abb. 4.7 (oben) den Spektren für den $(\text{Ga}_{0.78}\text{In}_{0.22})\text{Sb}$ -Quantenfilm gegenübergestellt, wobei den Simulationen in beiden Fällen eine inhomogene Verbreiterung mit einer Halbwertsbreite von 10 meV und identische Ladungsträgerdichten zugrunde liegen. Offensichtlich übersteigt der Materialgewinn, der durch die GaSb-basierte Quantenfilmstruktur erzielt werden kann, deutlich den Materialgewinn der vergleichbaren GaAs-basierten Quantenfilmstruktur.

Die vorteilhaften Verstärkungseigenschaften des $(\text{GaIn})\text{Sb}$ -Systems lassen sich im Rahmen der mikroskopischen Analyse auf Bandstruktureffekte zurückführen. Zunächst einmal fördert allein

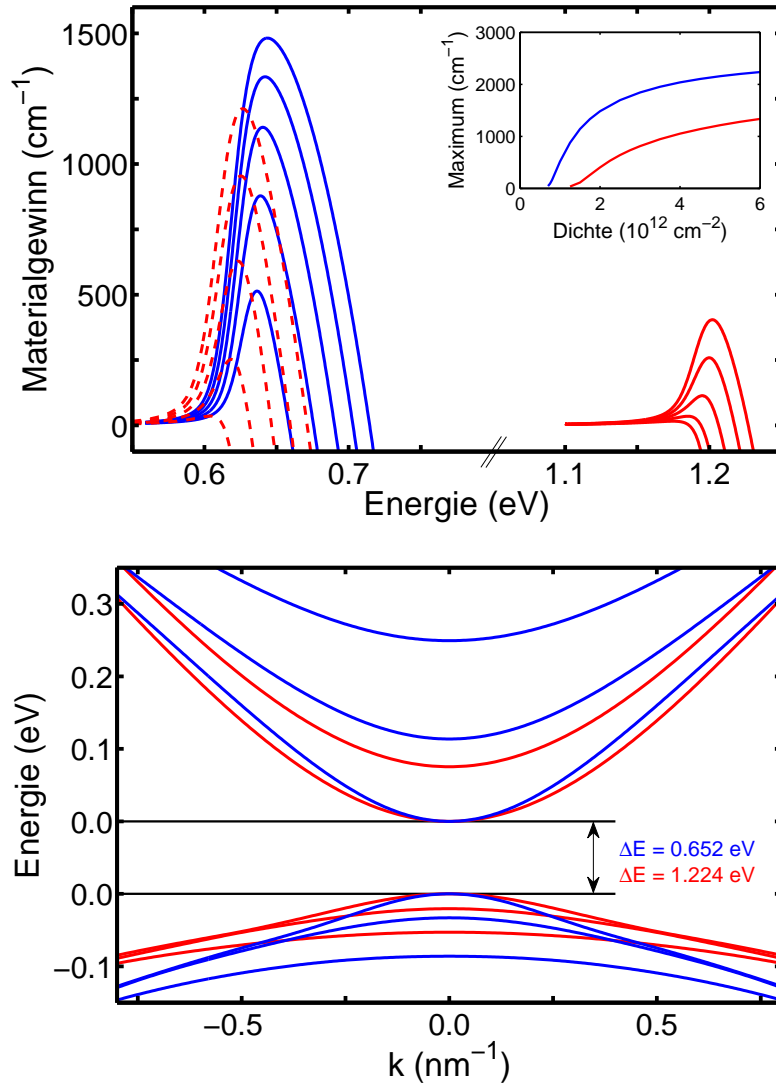


Abbildung 4.7.: (oben) Materialgewinnspektren für einen 10 nm breiten $(\text{Ga}_{0.78}\text{In}_{0.22})\text{Sb}/(\text{Al}_{0.30}\text{Ga}_{0.70})(\text{As}_{0.02}\text{Sb}_{0.98})$ -Quantenfilm (blaue Linien) und einen 10 nm breiten $(\text{Ga}_{0.80}\text{In}_{0.20})\text{As}/\text{GaAs}$ -Quantenfilm (rote durchgezogene Linien) bei einer Temperatur von 280 K und einer inhomogenen Verbreiterung von 10 meV. Wenn man die fundamentale Bandlücke des GaAs-basierten Systems künstlich auf den Wert des GaSb-basierten Systems reduziert (0.541 eV für das Quantenfilm-material und 1.157 eV für das Barrierenmaterial), ergeben sich die rot gestrichelten Spektren. In den Simulationen sind jeweils Ladungsträgerdichten von 1, 1.25, 1.5, 1.75 und $2 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ (von unten nach oben) angenommen. Die Einfügung zeigt das Maximum des Materialgewinns für die GaSb-basierte und die GaAs-basierte Quantenfilmstruktur als Funktion der Ladungsträgerdichte. (unten) Zugrunde liegende Bandstruktur für die GaSb-basierte (blaue Linien) und die GaAs-basierte (rote Linien) Quantenfilmstruktur. Um die Dispersion der Subbänder der beiden Systeme miteinander vergleichen zu können, ist die effektive Bandlücke ΔE in der Darstellung entsprechend angepasst; für das GaSb-basierte System beträgt die effektive Bandlücke 0.652 eV und für das GaAs-basierte System beträgt sie 1.224 eV.

die kleine Bandlücke von (GaIn)Sb einen hohen Materialgewinn. Um diesen Aspekt zu verdeutlichen, werden erneut Materialgewinnspektren für die (GaIn)As-Quantenfilmstruktur berechnet, allerdings soll die fundamentale Bandlückenenergie in den Simulationen nun künstlich reduziert werden. So wird statt der Bandlückenenergie, die durch die Materialparameter der binären Komponenten von (GaIn)As festgelegt ist, ein Wert von 0.541 eV vorgegeben, welcher gerade die fundamentale Bandlücke von (GaIn)Sb charakterisiert. Auch die Bandlückenenergie der Barrieren wird entsprechend angepasst. Die resultierenden Spektren sind in Abb. 4.7 (oben) rot gestrichelt eingezeichnet und belegen, dass sich der Materialgewinn mit einer nachgebildeten kleineren Bandlücke mehr als verdoppelt.

Außerdem wirkt sich die spezifische Banddispersion des (GaIn)Sb-Systems positiv auf die Verstärkungseigenschaften aus. Dazu wird ein direkter Vergleich mit der Bandstruktur des (GaIn)As-Systems gezogen (Abb. 4.7 (unten)). Offensichtlich sind die einzelnen Subbänder der GaSb-basierten Quantenfilmstruktur stärker gekrümmt, was kleinere effektive Massen impliziert. Am Bandminimum kann das tiefste Elektronsubband durch eine effektive Masse von $0.05 m_0$ und das tiefste Lochsubband durch eine effektive Masse von $0.07 m_0$ beschrieben werden, wobei m_0 die freie Elektronenmasse bezeichnet. Hingegen wird für die GaAs-basierte Quantenfilmstruktur eine effektive Masse von $0.06 m_0$ für das tiefste Elektronsubband und eine effektive Masse von $0.12 m_0$ für das tiefste Lochsubband extrahiert. Das (GaIn)Sb-System zeichnet sich also durch eine kleine Lochmasse aus, die der Elektronenmasse ähnlich ist. Da diese Situation gerade eine niedrige Transparenzladungsträgerdichte und einen hohen differentiellen Gewinn bewirkt [8], bietet das (GaIn)Sb-System Vorteile im Vergleich zum (GaIn)As-System mit schwereren und stark unterschiedlichen Elektron- und Lochmassen.

Darüber hinaus weisen sowohl die Elektron- als auch die Lochsubbänder der GaSb-basierten Quantenfilmstruktur einen größeren energetischen Abstand voneinander auf. Somit werden in dem System Zustände in höheren Subbändern weniger dicht besetzt und die Anzahl der Ladungsträger in Zuständen, die zum Laserprozess beitragen, steigt bei einer vorgegebenen Ladungsträgerdichte.

Folglich führt die Kombination dieser Besonderheiten der Bandstruktur zu den ausgezeichneten Verstärkungseigenschaften des (GaIn)Sb-Systems. Maximal lässt sich ein Materialgewinn von 2500 cm^{-1} an der Laserwellenlänge um $1.94 \mu\text{m}$ erzielen (Einfügung in Abb. 4.7 (oben)). Die Sättigung der Gewinnamplitude mit zunehmender Ladungsträgerdichte ist mit dem Herauswachsen eines zweiten Maximums in den Materialgewinnspektren verknüpft, das durch Übergänge zwischen dem zweittiefsten Elektronsubband und dem zweittiefsten Lochsubband verursacht wird und erscheint, wenn die Ladungsträgerdichte $4 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ überschreitet. Der Materialgewinn, der aus der GaSb-basierten Struktur maximal extrahiert werden kann, ist fast zweimal so groß wie der Wert für die GaAs-basierte Quantenfilmstruktur.

4.4. Laserverluste

Der hohe Materialgewinn von (GaIn)Sb-Quantenfilmen schafft optimale Voraussetzungen zur Konstruktion von effizienten Lasern. Zur vollständigen Charakterisierung und Bewertung des Materialsystems müssen allerdings auch die Ladungsträgerverlustmechanismen beachtet werden, zu denen strahlende und Auger-Rekombinationsprozesse zählen. Ihre Abhängigkeit von der Ladungsträgerdichte wird im Folgenden studiert und schließlich zur Vorhersage von Schwellenströmen genutzt, so dass ein Vergleich mit experimentellen Beobachtungen möglich wird.

4.4.1. Analyse der Ladungsträgerverlustmechanismen

Die strahlende Verluststromdichte, die sich auf der Basis der mikroskopischen Gleichungen nach Kapitel 2.4.1 ergibt, ist in Abb. 4.8 (links, durchgezogene Linie) für einen 10 nm breiten $(\text{Ga}_{0.78}\text{In}_{0.22})\text{Sb}/(\text{Al}_{0.30}\text{Ga}_{0.70})(\text{As}_{0.02}\text{Sb}_{0.98})$ -Quantenfilm bei einer Temperatur von 280 K als Funktion der Ladungsträgerdichte dargestellt. Das System steht auch im Zentrum der Untersuchung von Kapitel 4.3 und wird durch eine Transparenzlادungsträgerdichte von $0.7 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ charakterisiert. Nur im Ladungsträgerdichtebereich deutlich unterhalb des Transparenzpunkts wächst die Verluststromdichte J_{SE} in etwa quadratisch mit der Ladungsträgerdichte N . Der quadratische Zusammenhang $J_{\text{SE}} = B N^2$ ist als gestrichelte Linie eingezeichnet, wobei der Koeffizient B an die mikroskopischen Ergebnisse für niedrige Ladungsträgerdichten angepasst worden ist. In diesem Bereich kann die Besetzung der Zustände gerade durch Maxwell-Boltzmann-Verteilungen beschrieben werden, mit denen sich näherungsweise eine quadratische Dichteabhängigkeit des Verluststroms ableiten lässt [69]. Wenn man die Ladungsträgerdichte aber für den Laserbetrieb weiter erhöht, nehmen die Ladungsträgerverteilungen vielmehr die Form von stufenförmigen Fermi-Dirac-Funktionen an. Damit vergrößert sich die Besetzung für einen bestimmten Wellenvektor nicht weiter linear mit der vorgegebenen Ladungsträgerdichte, sondern für kleine Wellenvektoren hat sie bereits Werte nahe 1 erreicht und ändert sich kaum; die Besetzung dehnt sich allein auf Zustände mit höheren Wellenvektoren aus. Da ein Loch bei einem bestimmten Wellenvektor aber nur mit einem Elektron beim gleichen Wellenvektor rekombinieren kann, erhöht sich in dieser Situation die Wahrscheinlichkeit für spontane Emissionsprozesse nicht weiter mit der Ladungsträgerdichte und die strahlende Lebensdauer bleibt weitgehend konstant, was einem linearen Anstieg des Verluststroms mit der Ladungsträgerdichte entspricht. Der Übergang von der quadratischen in eine eher lineare Abhängigkeit spiegelt sich in der doppelt-logarithmischen Auftragung von Abb. 4.8 (links) durch den flacher werdenden Verlauf der Kurve für Ladungsträgerdichten oberhalb des Transparenzpunktes wider. Um also Vorhersagen für den Verluststrom unter Laserbedingungen treffen zu können, ist eine mikroskopische Beschreibung der spontanen Emissionsprozesse unverzichtbar.

Neben den Verlusten durch spontane Emission ist in Abb. 4.8 (rechts, durchgezogene Linie) auch die Auger-Verluststromdichte, die nach Kapitel 2.4.2 ermittelt wird, für die Quantenfilmstruktur in Abhängigkeit der Ladungsträgerdichte aufgetragen. Die Auger-Rate nimmt ebenfalls mit der Ladungsträgerdichte zu, da sie von der Besetzung der beteiligten Zustände bestimmt ist. Für

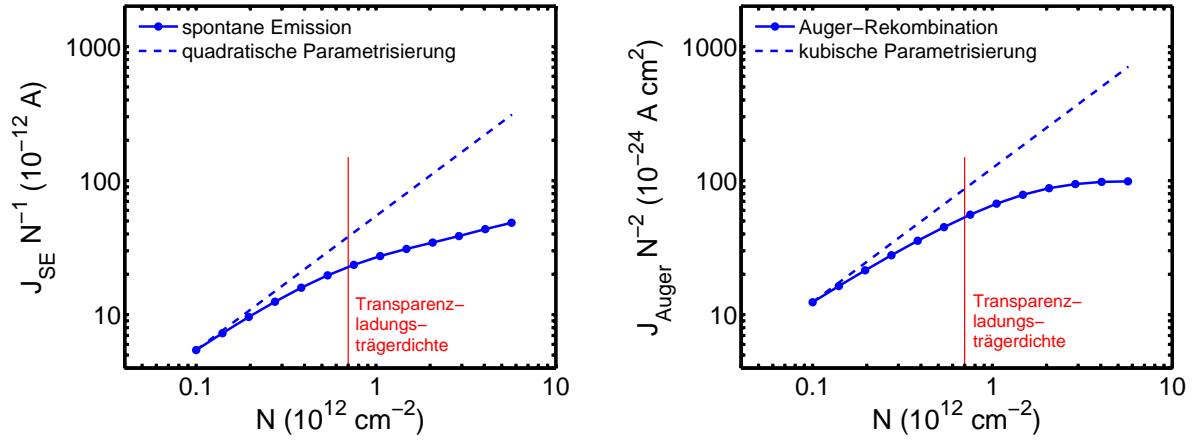


Abbildung 4.8.: Abhängigkeit der Verluststromdichte durch spontane Emission (J_{SE}) und Auger-Rekombination (J_{Auger}) von der Ladungsträgerdichte für einen 10 nm breiten $(Ga_{0.78}In_{0.22})Sb/(Al_{0.30}Ga_{0.70})(As_{0.02}Sb_{0.98})$ -Quantenfilm bei einer Temperatur von 280 K. Als Funktion der Ladungsträgerdichte N sind J_{SE}/N (*links*) und J_{Auger}/N^2 (*rechts*) aufgetragen (durchgezogene Linien). Die gestrichelten Linien geben eine quadratische (*links*) und eine kubische (*rechts*) Dichteabhängigkeit wieder, die an die mikroskopischen Berechnungen im Bereich niedriger Dichten angepasst sind. Für die Parametrisierung $J_{SE} = B N^2$ und $J_{Auger} = C N^3$ werden Koeffizienten von $B = 5,45 \cdot 10^{-23} \text{ A cm}^2$ und $C = 1,24 \cdot 10^{-34} \text{ A cm}^4$ verwendet.

niedrige Ladungsträgerdichten kann der hochenergetische Zustand, der am Auger-Prozess beteiligt ist, als unbesetzt angesehen werden, und die Auger-Verluste wachsen mit der Besetzung der drei übrigen am Auger-Prozess beteiligten Zustände nahe der Bandkante. Daher können die Auger-Verluste in diesem Bereich durch eine kubische Abhängigkeit von der Ladungsträgerdichte beschrieben werden ($J_{Auger} = C N^3$). Für höhere Ladungsträgerdichten, insbesondere oberhalb des Transparenzpunktes, zeigt sich aber ein eher quadratischer als kubischer Zusammenhang. Diese Änderung der Dichteabhängigkeit kommt analog zum Verhalten der strahlenden Verluste durch Phasenraumfülleffekte zustande. Zudem nimmt die Abschirmung der Coulomb-Wechselwirkung und die Besetzung von Barrierenzuständen mit steigender Ladungsträgerdichte zu, was zu kleineren Auger-Beiträgen führt.

Auger-Prozesse stellen unter Laserbedingungen offensichtlich den zentralen Ladungsträgerverlustmechanismus im (GaIn)Sb-System dar (Abb. 4.9, blaue Linien). Am Transparenzpunkt übersteigt der Auger-Verluststrom den strahlenden Verluststrom bereits fast um einen Faktor zwei. Die Dominanz der Auger-Prozesse unterscheidet GaSb-basierte Strukturen von anderen Materialsystemen. Zur Illustration sind die Verlustströme im (GaIn)Sb-System Simulationsergebnissen einer GaAs-basierten Quantenfilmstruktur gegenübergestellt, die auch in Kapitel 4.3.2 für einen Vergleich der Verstärkungseigenschaften herangezogen worden ist. Während die Verlustströme durch spontane Emission in den beiden Systemen ähnliche Werte aufweisen, fallen die Auger-Beiträge im (GaIn)Sb-System um mehr als zwei Größenordnungen höher aus als im (GaIn)As-System. Dies lässt sich im Wesentlichen auf die unterschiedlichen Bandlücken der Systeme zurückführen: Wird die Bandlücke verkleinert, erhöht sich die Kopplung der beteiligten Zustände, so dass bei gleicher Ladungsträgerdichte die Wahrscheinlichkeit der Auger-Rekombination

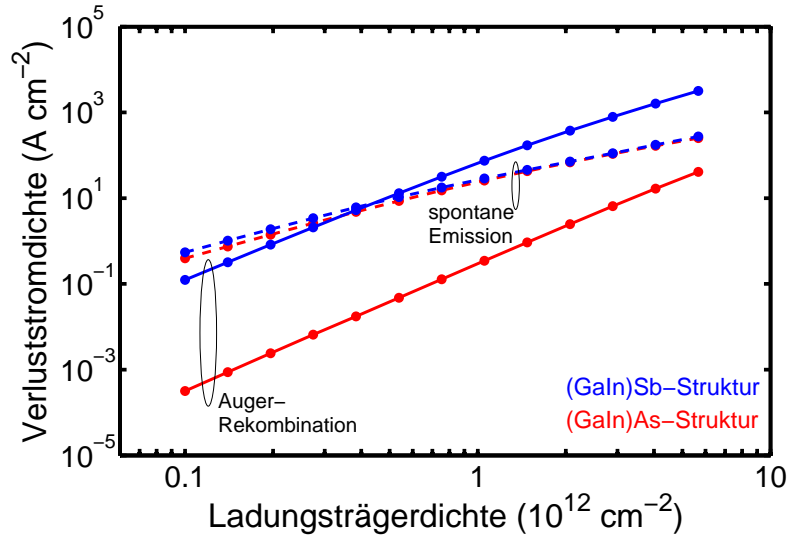


Abbildung 4.9.: Verluststromdichte durch spontane Emission und Auger-Rekombination als Funktion der Ladungsträgerdichte für einen 10 nm breiten $(\text{Ga}_{0.78}\text{In}_{0.22})\text{Sb}/(\text{Al}_{0.30}\text{Ga}_{0.70})(\text{As}_{0.02}\text{Sb}_{0.98})$ -Quantenfilm (blaue Linien) und einen 10 nm breiten $(\text{Ga}_{0.80}\text{In}_{0.20})\text{As}/\text{GaAs}$ -Quantenfilm (rote Linien) bei einer Temperatur von 280 K. Der Beitrag durch spontane Emission ist jeweils als gestrichelte Linie und der Beitrag durch Auger-Rekombination ist als durchgezogene Linie dargestellt.

steigt. Die Abhängigkeit der Auger-Rate von der Bandlücke zeigt sich auch beim Vergleich verschiedener Studien in der Literatur. Trägt man die Untersuchung unterschiedlicher Halbleitermaterialien zusammen [102, 103, 104], lässt sich der Trend einer steigenden Auger-Rate mit zunehmender Emissionswellenlänge erkennen. Prinzipiell wird die Realisierung von effizienten Halbleiterlasern mit Emissionswellenlängen um $2\text{ }\mu\text{m}$ aufgrund der hohen Auger-Verluste also erschwert.

4.4.2. Auswertung des Verluststroms an der Laserschwelle

Um die mikroskopische Berechnung der Ladungsträgerverluste im (GaIn)Sb-System zu verifizieren, werden aus der theoretischen Analyse Schwellenströme für verschiedene Laserstrukturen abgeleitet, die mit experimentellen Werten⁶ verglichen werden können. Tab. 4.1 fasst die Auswertung zusammen, die im Folgenden vorgestellt und diskutiert wird.

Untersucht werden drei Laserstrukturen, die in ihrem aktiven Bereich einen, zwei und drei $(\text{Ga}_{0.78}\text{In}_{0.22})\text{Sb}$ -Quantenfilme enthalten. Abgesehen von der Anzahl der Quantenfilme unterscheiden sich die Entwürfe nicht von der im Kapitel 4.3.1 vorgestellten Laserstruktur. Die Proben sind jeweils als Breitstreifenlaser mit einer Länge von $1000\text{ }\mu\text{m}$ und einer Breite von $150\text{ }\mu\text{m}$ ausgeführt. Die beim Spalten erzeugten Endflächen wirken dabei als Resonatorspiegel, deren Reflektivität durch den Brechungsindexunterschied zwischen dem Halbleitermaterial und der

⁶Die experimentelle Untersuchung ist von M. Rattunde, N. Schulz und J. Wagner (Fraunhofer-Institut für Angewandte Festkörperphysik, Freiburg) durchgeführt worden.

	1 Quantenfilm	2 Quantenfilme	3 Quantenfilme
$\alpha_m + \alpha_i$	17.1 cm ⁻¹	19.1 cm ⁻¹	20.2 cm ⁻¹
$N_{\text{Schwelle}}/\text{QW}$	$1.155 \cdot 10^{12}$ cm ⁻²	$0.945 \cdot 10^{12}$ cm ⁻²	$0.875 \cdot 10^{12}$ cm ⁻²
J_{SE}/QW	33 A cm ⁻²	25 A cm ⁻²	22 A cm ⁻²
$J_{\text{Auger}}/\text{QW}$	94 A cm ⁻²	57 A cm ⁻²	47 A cm ⁻²
J_{gesamt}	127 A cm ⁻²	164 A cm ⁻²	207 A cm ⁻²
J_{exp}	160 A cm ⁻²	247 A cm ⁻²	267 A cm ⁻²
$\Delta J/\text{QW}$	33 A cm ⁻²	42 A cm ⁻²	20 A cm ⁻²

Tabelle 4.1.: Auswertung des Verluststroms an der Laserschwelle für drei Strukturen, die sich in der Anzahl der (Ga_{0.78}In_{0.22})Sb-Quantenfilme (QW) im aktiven Bereich unterscheiden. Aufgelistet sind die erforderliche Schwellenverstärkung ($\alpha_m + \alpha_i$), die mikroskopisch abgeleitete Schwellenladungsträgerdichte (N_{Schwelle}) pro Quantenfilm, die berechnete strahlende und Auger-Verluststromdichte an der Laserschwelle (J_{SE} und J_{Auger}) bezogen auf einen Quantenfilm sowie die Summe der beiden Beiträge bezogen auf die Gesamtstruktur (J_{gesamt}). Die Werte sind den Schwellenströmen (J_{exp}) gegenübergestellt, die in den jeweiligen $1000 \times 150 \mu\text{m}^2$ Breitstreifenlasern von M. Rattunde, N. Schulz und J. Wagner (Fraunhofer-Institut für Angewandte Festkörperphysik, Freiburg) gemessen worden sind. Die Differenz zwischen den theoretischen und experimentellen Ergebnissen (ΔJ) ist in der letzten Spalte bezüglich eines Quantenfilms angegeben. Die Untersuchungen sind bei einer Temperatur von 280 K durchgeführt worden.

Umgebungsluft auf 32 % festgelegt ist. Entsprechend wird ein Teil des Laserlichts ausgekoppelt, was einen Verlust für die Photonendichte im Resonator darstellt. Es gilt [8]

$$\alpha_m = -\frac{1}{2L} \ln(R_1 R_2), \quad (4.3)$$

wobei α_m die optischen Verluste durch die Spiegel, L die Resonatorlänge und $R_{1/2}$ die Reflektivitäten der beiden Austrittsfacetten bezeichnen. Damit ergeben sich für die vorliegenden Strukturen Spiegelverluste von 11.4 cm⁻¹. Neben den optischen Verlusten durch das ausgekoppelte Laserlicht spielen außerdem interne Verluste eine Rolle, die beispielsweise durch Freie-Ladungsträger-Absorption oder Intervallenzband-Absorption verursacht werden. Die internen Verluste α_i der drei Laserstrukturen sind experimentell aus der Abhängigkeit der Steigung der Leistungs-Strom-Kennlinie von der Resonatorlänge ermittelt worden und betragen 5.7, 7.7 und 8.8 cm⁻¹ für den Laser mit einem, zwei und drei Quantenfilmen [105].

An der Laserschwelle müssen die Spiegelverluste und die internen Verluste durch die optische Verstärkung des Systems gerade ausgeglichen werden. Die Ladungsträgerdichte, die notwendig ist, um den erforderlichen Modalgewinn, d. h. $\alpha_m + \alpha_i$, zu erzielen, lässt sich anhand der mikroskopischen Simulationen bestimmen. Dazu werden Modalgewinnspektren für die drei Lasersysteme berechnet, indem analog zu Kapitel 4.3.1 die Materialgewinnspektren eines einzelnen Quantenfilms mit dem spezifischen Einschlussfaktor für die Lasermode multipliziert werden. Der Einschlussfaktor der verschiedenen Strukturen ergibt sich in guter Näherung aus dem Pro-

dukt der Quantenfilmanzahl und dem Einschlussfaktor für einen Quantenfilm. Auf diese Weise wird für die drei vorliegenden Laserstrukturen die Ladungsträgerdichte N_{Schwelle} bestimmt, mit der die Schwellenbedingung jeweils erfüllt wird; die Ergebnisse sind in Tab. 4.1 aufgeführt. Obwohl die optischen Verluste in den Strukturen mit zunehmender Quantenfilmanzahl steigen, ist die Schwellenladungsträgerdichte pro Quantenfilm für die Struktur mit den drei Quantenfilmen am kleinsten, denn in diesem Fall muss jeder Quantenfilm nur ein Drittel der Schwellenverstärkung beisteuern, und es reichen entsprechend niedrige Ladungsträgerdichten in den einzelnen Quantenfilmen aus.

Mit den extrahierten Ladungsträgerdichten können schließlich Prognosen für die Ladungsträgerverluste durch spontane Emission und Auger-Rekombination an der Laserschwelle getroffen werden. Insgesamt sagen die mikroskopischen Berechnungen Verlustströme von 127, 164 und 207 A cm⁻² für die Laserstruktur mit einem, zwei und drei Quantenfilmen voraus. Auch die gemessenen Schwellenströme nehmen mit der Anzahl der Quantenfilme in der Struktur zu, allerdings sind sie insgesamt größer. Der Unterschied zwischen dem theoretischen Verluststrom und dem experimentellen Ergebnis liegt je nach Struktur zwischen 20 und 42 A cm⁻² pro Quantenfilm. Dieser Beitrag kann defektassistierten Rekombinationen und Leckströmen zugeschrieben werden, die im mikroskopischen Modell nicht erfasst sind, und die die Ladungsträgerdichte in den Quantenfilmen zusätzlich verringern können.

Es ist anzumerken, dass die Auger-Raten sensibel auf minimale Änderungen des Bandkantenverlaufs der Quantenfilmstruktur reagieren. Nimmt man beispielsweise eine Bandkantenversetzung von $\Delta E_{\text{LB}}/\Delta E_{\text{VB}} = 60\%$ anstatt der 70 % an, die für die Versetzung der Bänder zwischen der (Ga_{0.78}In_{0.22})Sb- und der (Al_{0.30}Ga_{0.70})(As_{0.02}Sb_{0.98})-Schicht im Rahmen dieser Analysen verwendet worden ist, dann ergibt sich für die Struktur mit einem Quantenfilm an der Schwelle eine Auger-Verluststromdichte, die ein Drittel kleiner ausfällt. Leichte Unsicherheiten der Materialparameter werden also in der mikroskopischen Berechnung der Auger-Beiträge weiter verstärkt. Um die Fehlergrenzen einzuschränken, sollte die optische Charakterisierung des Materialsystems, beispielsweise mittels Modulationsspektroskopie wie in Kapitel 4.2 diskutiert, weiter verfolgt werden.

Darüber hinaus ist ein systematischer Vergleich mit Experimenten wünschenswert, in denen die Beträge durch Defektrekombination, spontane Emission und Auger-Rekombination aufgeschlüsselt werden, wie in [106] an (GaIn)(NAs)-basierten Laserstrukturen durchgeführt. Mit solchen Untersuchungen ließe sich die mikroskopische Berechnung der einzelnen Anteile der Ladungsträgerverluste im (AlGaIn)(AsSb)-Materialsystem explizit verifizieren. Gleichzeitig könnte man durch den Vergleich von experimentellen und theoretischen Ergebnisse möglicherweise auch Rückschlüsse auf die Bandkantenversetzung ziehen.

4.5. Designstudien

Da im Rahmen der mikroskopischen Theorie sowohl die Verstärkungseigenschaften als auch die Ladungsträgerverlustmechanismen einer Quantenfilmstruktur bestimmt werden können, lassen sich relevante Lasercharakteristika des Systems wie beispielsweise das Schwellenverhalten systematisch untersuchen. Solche Studien können schließlich genutzt werden, um für spezifische Anwendungen optimierte Laserstrukturen zu entwickeln.

Zur Illustration werden zwei unterschiedliche Entwürfe für eine Laserstruktur, die Licht bei einer Wellenlänge von $2\text{ }\mu\text{m}$ emittieren soll, vorgestellt und analysiert. Der Quantenfilm des einen Entwurfs soll aus $(\text{Ga}_{0.78}\text{In}_{0.22})\text{Sb}$ bestehen, eine Breite von 10 nm aufweisen und von $(\text{Al}_{0.30}\text{Ga}_{0.70})\text{Sb}$ -Barrieren umgeben sein. Die Struktur wird im Folgenden als Design A bezeichnet. Der zweite Entwurf, im Folgenden als Design B bezeichnet, soll einen 12 nm breiten Quantenfilm, der sich aus $(\text{Ga}_{0.80}\text{In}_{0.20})\text{Sb}$ zusammensetzt, enthalten. Als Barrierenmaterial wird $(\text{Al}_{0.25}\text{Ga}_{0.75})\text{Sb}$ gewählt, so dass verglichen mit den $(\text{Al}_{0.30}\text{Ga}_{0.70})\text{Sb}$ -Schichten in Design A eine niedrigere Barrierenhöhe realisiert wird.

Mit den vorgeschlagenen Strukturparametern wird der Materialgewinn beider Entwürfe um eine Energie von 0.62 eV maximal. Abb. 4.10 (oben) zeigt die Ergebnisse für verschiedene Ladungsträgerdichten, die sich nach den Halbleiter-Bloch-Gleichungen bei einer Temperatur von 300 K ergeben. Vergleicht man die Spektren der beiden Quantenfilmstrukturen für jeweils gleiche Ladungsträgerdichten, erkennt man, dass die Amplitude des Materialgewinns von Design A die Amplitude von Design B deutlich übersteigt. Der Laserübergang ist in Design B schwächer, weil die Ladungsträger aufgrund des breiteren Quantenfilms und der kleineren Bandlücke der Barrierschichten weniger im Quantenfilm lokalisiert sind.

Insgesamt stellt Design A also einen höheren Materialgewinn zur Verfügung als Design B, jedoch werden die Ladungsträgerverluste erheblich reduziert, wenn man Design B wählt (Abb. 4.10 (unten)). Nach der mikroskopischen Berechnung werden die Auger-Prozesse mit Design B um mehr als einen Faktor zwei gegenüber Design A unterdrückt. Die starke Abhängigkeit der Auger-Raten vom gewählten Layout lässt sich zum einen auf die modifizierte Kopplungsstärke der Zustände zurückführen, die durch die unterschiedlichen Barrieren in den Strukturen verursacht wird. Da die Höhe der Barrieren in Design B kleiner ist, muss bei Auger-Prozessen ein entsprechend großer Anteil von Barrierenzuständen mit höheren Wellenvektoren involviert sein. Die Beteiligung dieser Zustände bedingt kleinere Coulomb-Matrixelemente, und somit nimmt der Auger-Verluststrom ab, wenn man von Design A zu Design B übergeht. Zum anderen bindet der Quantenfilm in Design B mit seinen niedrigen Barrieren weniger Ladungsträger, so dass die Anzahl der Auger-Prozesse sinkt.

Ebenso reduziert die schwächere Bindung der Ladungsträger in Design B die Wahrscheinlichkeit dafür, dass ein Elektron-Loch-Paar strahlend rekombiniert. Somit fallen auch die Verluste durch spontane Emission in Design B kleiner aus als in Design A; die Unterschiede sind aber relativ klein. Entscheidend für das GaSb-basierte Lasersystem ist vielmehr die enorme Reduktion der Auger-Verluste, die mit der Wahl eines passenden Designs erzielt werden kann.

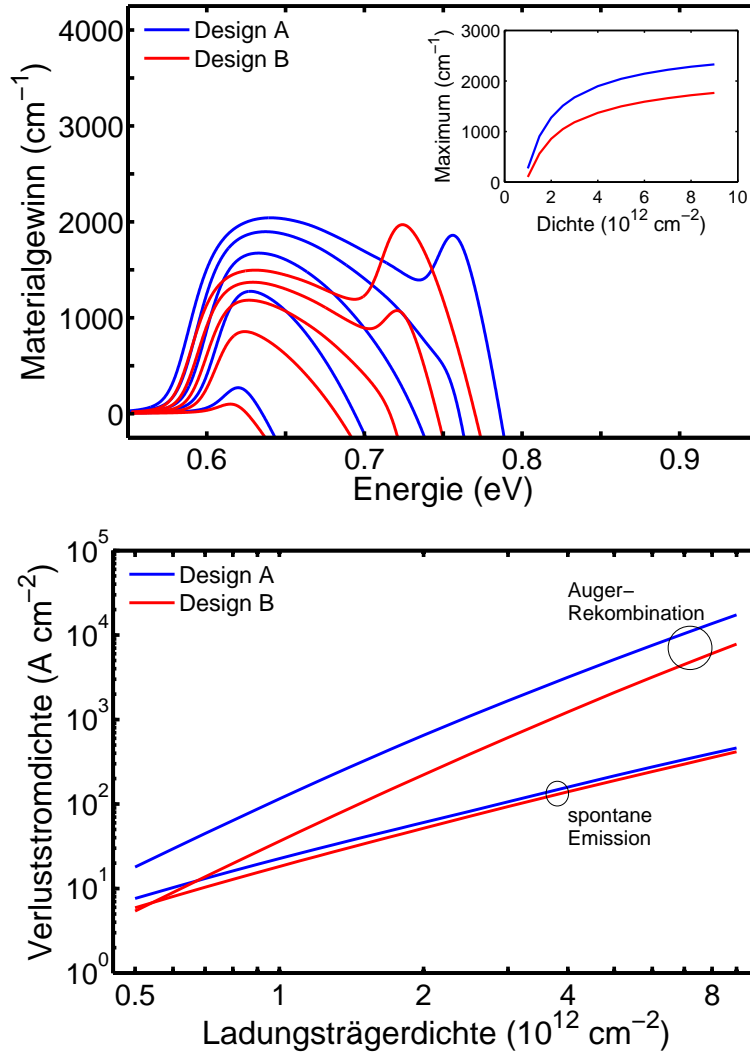


Abbildung 4.10.: (oben) Materialgewinnspektren für einen 10 nm breiten $(\text{Ga}_{0.78}\text{In}_{0.22})\text{Sb}/(\text{Al}_{0.30}\text{Ga}_{0.70})\text{Sb}$ -Quantenfilm (Design A, blaue Linien) und einen 12 nm breiten $(\text{Ga}_{0.80}\text{In}_{0.20})\text{Sb}/(\text{Al}_{0.25}\text{Ga}_{0.75})\text{Sb}$ -Quantenfilm (Design B, rote Linien) bei einer Temperatur von 300 K und einer inhomogenen Verbreiterung von 10 meV. Es werden Ladungsträgerdichten von 1, 2, 3, 4 und $5 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ (von unten nach oben) angenommen. Die Einfügung zeigt das Maximum des Materialgewinns für die beiden Strukturen als Funktion der Ladungsträgerdichte. (unten) Verluststromdichte durch spontane Emission und Auger-Rekombination als Funktion der Ladungsträgerdichte für Design A (blaue Linien) und Design B (rote Linien) bei einer Temperatur von 300 K.

Um das Potential der beiden vorgeschlagenen Designs einzuschätzen und zu bewerten, wird die mikroskopische Auswertung der Verstärkungseigenschaften mit der mikroskopischen Analyse der Laserverluste kombiniert. Dazu wird für Design A und Design B die Ladungsträgerdichte extrahiert, die notwendig ist, um eine bestimmte Materialgewinnamplitude zu erzielen. Da diese Ladungsträgerdichte mit spezifischen Verlustströmen durch spontane Emission und Auger-Rekombination verknüpft ist, kann man den Verluststrom als Funktion des vorgesehen Materi-

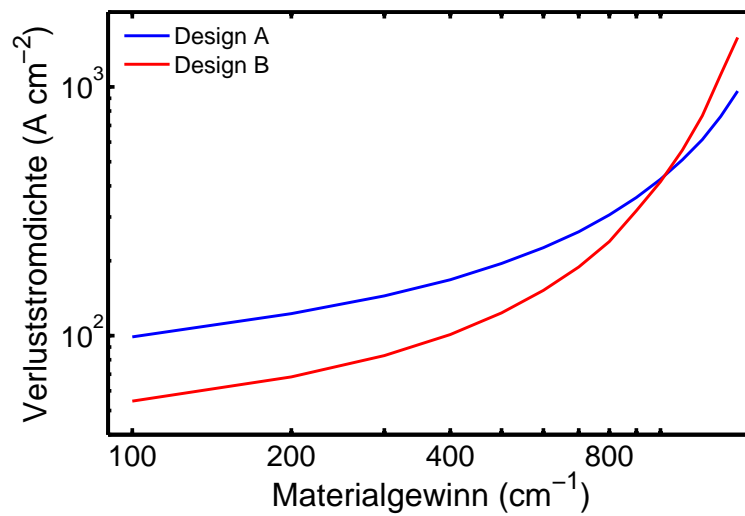


Abbildung 4.11.: Verluststromdichte in Abhängigkeit des Materialgewinns für Design A (blaue Linie) und Design B (rote Linie) bei einer Temperatur von 300 K. Die Angaben für die Stromdichte beinhalten sowohl die strahlenden als auch die Auger-Verluste.

algewinns bestimmen (Abb. 4.11). Wenn man diese Verluste durch einen entsprechend großen Pumpstrom kompensiert, werden dem Quantenfilm gerade die Ladungsträger, die durch Verlustprozesse verloren gehen, wieder zur Verfügung gestellt wird, so dass der vorgesehene Materialgewinn aufrecht erhalten werden kann.

Je kleiner der Verluststrom einer Struktur bei einem spezifischen Materialgewinn ist, umso effizienter kann der Laser betrieben werden. Die Simulationen zeigen, dass Design A vorteilhaft ist, wenn man einen Materialgewinn von mehr als 1000 cm^{-1} anstrebt. In dieser Situation ist der erforderliche Pumpstrom kleiner als im Fall von Design B, dessen Effizienz unter den gegebenen Betriebsbedingungen bereits durch Sättigungseffekte des Materialgewinns beeinträchtigt wird. Um einen Laser mit niedriger Schwelle zu realisieren, bietet sich hingegen Design B an. Aufgrund des kleinen Verluststroms eignet sich der Entwurf, solange für die Anwendung eine Materialgewinnamplitude bis zu 1000 cm^{-1} ausreicht. Sieht man beispielsweise einen Materialgewinn von 500 cm^{-1} vor, muss Design B mit einem Pumpstrom von 125 A cm^{-2} versorgt werden. Dies entspricht etwa 60 % des Pumpstroms, der in Design A aufgewendet werden muss, um den gleichen Materialgewinn zu erzielen.

Der Vergleich von Design A und Design B demonstriert, wie Laserstrukturen mit Hilfe des mikroskopischen Modells entworfen und optimiert werden können. In der vorgestellten Analyse sind Laserverluste durch die Ladungsträgerrekombination an Defekten vernachlässigt worden, denn diese hängen ausschließlich von der Materialqualität der Probe ab. Für eine reale Struktur werden sich also je nach Wachstumsqualität entsprechend größere Pumpströme ergeben.

Fazit

Mit dem mikroskopischen Modell gelingt eine Charakterisierung des (AlGaIn)(AsSb)-basierten Materialsystems, mit dem Laserquellen bei Emissionswellenlängen von $2\text{ }\mu\text{m}$ realisiert werden. Dies wird durch Vergleiche von theoretischen und experimentellen Spektren belegt; insbesondere wurden Übereinstimmungen in photomodulierten Reflektivitätsspektren und optischen Verstärkungsspektren nachgewiesen.

Vor dem Hintergrund der gelungenen Charakterisierung lässt sich die mikroskopische Theorie nutzen, um die hohen Gewinnamplituden, die (GaIn)Sb-Strukturen auszeichnen, aufzuklären. Die Analyse zeigt, dass diese Eigenschaft auf eine vorteilhafte Bandstruktur zurückzuführen ist. Gleichzeitig können auf der Basis dieser Bandstrukturparameter Rechnungen bezüglich der Ladungsträgerverluste angestellt werden. Dabei fallen insbesondere die hohen Auger-Beiträge auf.

Da sich also sowohl die Laserverstärkung als auch die Laserverluste quantitativ prognostizieren lassen, können systematische Designstudien durchgeführt werden. Somit sind Voraussetzungen geschaffen, (AlGaIn)(AsSb)-basierte Strukturen für spezifische Anwendungen gezielt zu optimieren.

5. Ga(NAsP)-basiertes Materialsystem

Die mikroskopische Modellierung und die grundlegende spektroskopische Analyse der optoelektronischen Eigenschaften lässt sich auch auf vollkommen neuartige Halbleitermaterialien anwenden. Mit dem verdünnt stickstoffhaltigen Ga(NAsP)-Materialsystem kann eine monolithische Integration von laseraktivem Halbleitermaterial auf Silizium realisiert werden.

Zunächst wird das Materialsystem vorgestellt und seine Besonderheiten im Hinblick auf eine Modellierung werden aufgezeigt (Kapitel 5.1). Daran anknüpfend wird in Kapitel 5.2 erläutert, wie die Aspekte in die theoretische Beschreibung eingebunden werden. Um zu prüfen, inwieweit sich der Ansatz eignet, die optischen Eigenschaften des Materialsystems realistisch wiederzugeben, wird die elektromodulierte Reflexion spezifischer Quantenfilmstrukturen untersucht (Kapitel 5.3). Außerdem werden Photolumineszenzspektren analysiert und zur Einordnung der relevanten Rekombinationsprozesse im Materialsystem genutzt (Kapitel 5.4). Schließlich werden in Kapitel 5.5 die optischen Verstärkungseigenschaften berechnet und studiert.

5.1. Einführung in das Materialsystem

5.1.1. Ga(NAsP) für die Silizium-Photonik

Die Vereinigung von mikroelektronischen, auf Silizium basierten und optoelektronischen, vorwiegend auf III-V-Halbleitermaterialien basierten Komponenten verspricht die Entwicklung von Bauelementen erweiterter Funktionalität und eröffnet neuartige Anwendungsfelder. Beispielsweise werden Laser zur optischen Datenübertragung in Schaltkreisen denkbar, so dass die Einschränkungen der Signalübertragung, die gegenwärtig durch die Geschwindigkeit von elektrischen Pulsen gesetzt werden, behoben werden, und eine weitere Steigerung der Taktraten gelingt. Eine Schlüsselkomponente für die Integration optoelektronischer Elemente in die Mikro- und Nanoelektronik ist also eine für den Siliziumchip geeignete Laserstruktur, die als Sendebau-element fungiert.

Da Silizium ein indirekter Halbleiter ist, damit eine geringe Lichtausbeute aufweist, und etablierte Halbleiterlasermaterialien wie GaAs und InP aufgrund der großen Gitterfehlpassung nur mit wenigen Monolagen pseudomorph auf Silizium abgeschieden werden können, gestaltet sich die Umsetzung schwierig. Um dies zu überwinden und eine effiziente Lichtemission auf Silizium-

Substrat zu erzielen, werden derzeit unterschiedliche Konzepte diskutiert, zu denen hybride Integrationsszenarien [107], verschiedene Formen von Silizium-Nanostrukturen [108], optisch gepumpte Ramanlaser auf Siliziumbasis [109] und Silizium/Germanium-Laser [110] zählen.

In einem alternativen Ansatz ist das Materialsystem Ga(NAsP) entwickelt worden, mit dem eine monolithische Integration von Lasermaterial auf Silizium-Substraten gelingt. Das Material lässt sich nicht nur pseudomorph auf GaP und damit wegen vergleichbarer Gitterkonstanten auch auf Silizium abscheiden, sondern es weist auch eine direkte Bandlücke auf [111]. So konnte für GaP-basierte Quantenfilmstrukturen mit Ga(NAsP) in den aktiven Schichten optische Verstärkung [112] und Laseroperation [113] nachgewiesen werden. Darauf aufbauend wird schließlich auch Laseremission von Ga(NAsP)-Strukturen auf Silizium-Substrat demonstriert [114].

Ga(NAsP) ist ein metastabiler Verbindungshalbleiter, d. h. aufgrund der geringen Löslichkeit von Stickstoff muss der Kristall unter extremen Nichtgleichgewichtsbedingungen abgeschieden werden [115]. Die spezifischen Wachstumsparameter, die gewählt werden, wirken sich merklich auf die optischen Eigenschaften aus, aber durch ein nachträgliches, kontrolliertes Ausheizen der Probe stellt sich schließlich eine Kristallkonstellation ein, die unabhängig von ihrer Vorgeschichte ist. Zudem erhöht sich durch das Ausheilen von Kristalldefekten bei der Temperaturbehandlung auch die Probenqualität [116]. Um die Reproduzierbarkeit sicherzustellen und um die optoelektronischen Eigenschaften des Ga(NAsP)-Materialsystems systematisch zu untersuchen, werden ausschließlich solche ausgeheizten Proben analysiert.

5.1.2. Elektronische Struktur von verdünnt stickstoffhaltigen Halbleitermaterialien

Verdünnt stickstoffhaltige Halbleitermaterialien, d. h. III-V-Mischkristalle mit einem Stickstoffanteil von typischerweise 0.5 bis 8 %, zeichnen sich durch ihre besondere Bandstruktur aus, die sich grundlegend von der konventioneller Verbindungshalbleiter unterscheidet. Die Bandlücke von III-V-Mischkristallen wie z. B. Ga(AsP) kann i. A. zwischen den Werten für die binären Komponenten interpoliert werden (virtuelle Kristallnäherung). Diese Beschreibung beruht darauf, dass die Störung durch die einzelnen Substituenten im Kristall nicht zu groß ist und die Fluktuation des Potentials entsprechend gemittelt werden kann. Der Ansatz eignet sich aber nicht, wenn ein Teil der Arsen- oder Phosphorgitterplätze durch Stickstoffatome ersetzt wird. Obwohl sie die gleiche Elektronenkonfiguration aufweisen, stellen die Stickstoffanionen lokale Störungen im Kristallpotential dar, denn Stickstoffanionen unterscheiden sich aufgrund ihrer geringen Größe und hohen Elektronegativität deutlich von Arsen- oder Phosphoranionen [117]. Das elektronische Niveau der stickstoffinduzierten isoelektrischen Störstellen ist mit dem Leitungsband des III-V-Halbleiterwirtsmaterials resonant [118] und modifiziert die elektronische Bandstruktur an der Leitungsbandkante signifikant. So zeigt sich unter anderem eine drastische Reduktion der Bandlücke, wenn man einen kleinen Anteil Stickstoff in den Halbleiterkristall einbringt.

Dieser Zusammenhang wird im Band-Abstoßungs-Modell (engl.: *band-anticrossing*, BAC) auf-

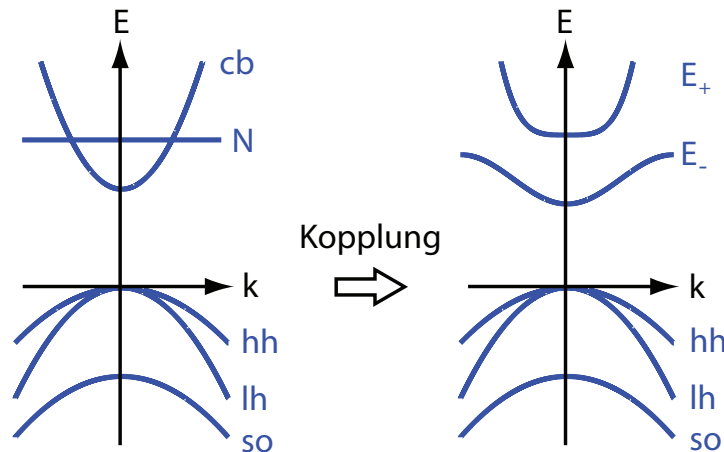


Abbildung 5.1.: Schematische Darstellung der Kopplung des Leitungsbands (cb) mit einem flachen Störstellenband (N) nach dem BAC-Modell. Die Wechselwirkung führt zu einer Aufspaltung in ein E_- - und ein E_+ -Band.

gefasst als Kopplung des Leitungsbands mit Zuständen der stark lokalisierten Stickstoffatome [119]. Die Wechselwirkung in dem Zwei-Niveau-System definiert eine Eigenwertgleichung und formt zwei Bänder, die gegenüber dem ungestörten Leitungsband bei einer niedrigeren (E_- -Band) und einer höheren (E_+ -Band) Energie liegen, wie in Abb. 5.1 schematisch skizziert ist. Neben der Aufspaltung des Leitungsbandes und der Bandlückenreduktion gibt der BAC-Ansatz auch deren geringe Druckabhängigkeit und die relativ große effektive Elektronenmasse wieder, die III-N-V-Halbleiter kennzeichnen. Eine ausführliche Diskussion am Beispiel von Ga(NAs) und (GaIn)(NAs), schon weit erforschten Vertretern der Materialklasse, findet sich in [120]. Dem BAC-Modell liegen zwar allein empirische Studien zugrunde, die Ergebnisse werden aber durch komplexe Bandstrukturrechnungen, die mit Näherungsverfahren quasi-gebundener Elektronen (engl.: *tight binding* oder *linear combination of atomic orbitals*) durchgeführt werden, bekräftigt [121, 122].

Außerdem wird die elektronische Struktur von III-N-V-Halbleitermaterialien durch starke Unordnungs- und Lokalisierungseffekte geprägt. Sie spielen eine größere Rolle als in konventionellen III-V-Verbindungshalbleitern, da die lokale Störung der Stickstoffatome die Translations-symmetrie des Kristalls bricht. Um den polymorphen Charakter der Strukturen zu berücksichtigen, ist ein Beschreibungsansatz mit Hilfe der empirischen Pseudopotentialmethode entwickelt worden [123]. Mit diesem Modell lassen sich Auswirkungen der statistischen Legierungsunordnung einschätzen, insbesondere können neben isolierten Stickstoffatomen auch Stickstoffpaar-konfigurationen einbezogen werden.

Ob auf der einen Seite das isomorphe Modell, das den Einfluss isolierter Stickstoffatome in das Bandstrukturkonzept einbindet, lokale Stickstoffanhäufungen aber unberücksichtigt lässt, oder auf der anderen Seite das polymorphe Modell, das statistische Unordnungseffekte aufgreift, eine realistische Beschreibung der optoelektronischen Eigenschaften des Materialsystems ermög-

lichen, hängt speziell davon ab, welcher Temperaturbereich und welche Anregungsbedingungen bei der Untersuchung vorliegen. Bei tiefen Temperaturen und niedrigen Anregungsdichten dominieren Unordnungseffekte, die sich z. B. in der ausgeprägten Stokes-Verschiebung zwischen Emission und Absorption [124] oder in der Blauverschiebung der Emissionswellenlänge mit zunehmender Temperatur in einem s-förmigen Verlauf [125] (engl.: *s-shape*) zeigen. Hingegen erweist sich das isomorphe Modell mit dem empirischen BAC-Ansatz vorteilhaft, um die optischen Eigenschaften im Hinblick auf Laseranwendungen, d. h. bei erhöhter Temperatur und Anregung, zu analysieren: Nach einer Parametrisierung der elektronischen Bandstruktur durch die Einführung eines stickstoffinduzierten Bandes ist es gelungen, eine Vielzahl von Ga(NAs)- und (GaIn)(NAs)-Strukturen realistisch zu simulieren. Beispielsweise konnten photomodulierte Reflektivitätsspektren [96], Photolumineszenzspektren sowie optische Verstärkungsspektren [126, 127, 128, 129] durch die Kombination des erweiterten Bandstrukturkonzepts mit der mikroskopischen Vielteilchentheorie in Übereinstimmung mit experimentellen Daten gebracht werden.

Für die neuartigen Ga(NAsP)-Strukturen sind anhand von Photolumineszenzmessungen bereits Lokalisierungseffekte im Tieftemperaturbereich nachgewiesen worden [130]. Der Einfluss der statistischen Legierungsunordnung auf die optischen Eigenschaften wird aber, wie beim Ga(NAs) bzw. (GaIn)(NAs)-Materialsystem, mit steigender Temperatur und Anregung an Bedeutung verlieren. Davon ausgehend wird, um Charakteristika im Hinblick auf den Laserbetrieb zu untersuchen, die elektronische Struktur des Ga(NAsP)-Systems im Rahmen dieser Arbeit mit dem empirischen BAC-Modell parametrisiert. Der Ansatz ermöglicht eine näherungsweise Bestimmung der elektronischen Energieeigenwerte und Eigenzustände und empfiehlt sich aufgrund seines geringen numerische Aufwands. Somit kann die Rechenkapazität der Simulationen weiterhin auf die Auswertung der komplexen Vielteilchenwechselwirkungen konzentriert werden, die die Lasereigenschaften maßgeblich bestimmen. Auf die Eignung des BAC-Modells zur Beschreibung der Bandlücke des Ga(NAsP)-Materials weisen auch verschiedene Studien in der Literatur hin [111, 131, 132, 133].

5.2. Einfluss von Stickstoff auf die Bandstruktur

5.2.1. Erweiterung der $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Matrix

Um den Einfluss der lokalen Stickstoffstörstellen in Ga(NAsP)-Quantenfilmen in die Bandstrukturechnung einzubeziehen, wird die $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Matrix (Kapitel 2.1.2) durch zwei spinentartete stickstoffartige Komponenten ergänzt, die nach dem BAC-Modell (Kapitel 5.1.2) als flache Störstellenbänder mit den ungestörten Leitungsbändern des Ga(AsP)-Materials wechselwirken. Die

Einbindung der BAC-Kopplung erweitert die 8×8 - zu einer 10×10 -Matrix [122, 134]:

$$\mathcal{H}_{\mathbf{k},\mathbf{p}} = \begin{pmatrix} H_{\text{so}} & V_{\text{hh-so}} & V_{\text{lh-so}} & V_{\text{cb-so}} & 0 \\ V_{\text{so-hh}} & H_{\text{hh}} & V_{\text{lh-hh}} & V_{\text{cb-hh}} & 0 \\ V_{\text{so-lh}} & V_{\text{hh-lh}} & H_{\text{lh}} & V_{\text{cb-lh}} & 0 \\ V_{\text{so-cb}} & V_{\text{hh-cb}} & V_{\text{lh-cb}} & H_{\text{cb}} & V_{\text{N}} \\ 0 & 0 & 0 & V_{\text{N}} & H_{\text{N}} \end{pmatrix} \begin{matrix} \leftarrow \text{so} \\ \leftarrow \text{hh} \\ \leftarrow \text{lh} \\ \leftarrow \text{cb} \\ \leftarrow \text{N} \end{matrix} \quad (5.1)$$

Mit der Entwicklung in Spin-Bahn-abgespaltene (so), schwerlochartige (hh), leichtlochartige (lh), leitungsbandartige (cb) und stickstoffartige (N) Anteile, die jeweils zweifach spinentartet sind, lassen sich schließlich die elektronischen Eigenzustände und Energieeigenwerte des Systems störungstheoretisch berechnen.

Die nicht-diagonalen Einträge der Matrix charakterisieren die Kopplung der Basisfunktionen, speziell wird die Wechselwirkung von cb- und N-artigen Bändern durch das Matrixelement

$$V_{\text{N}} = -\beta\sqrt{x} \quad (5.2)$$

festgelegt, das von der Stickstoffkonzentration x sowie vom empirischen BAC-Parameter β abhängt. Eine direkte Kopplung der N-artigen Bänder mit den Valenzbändern wird ausgeschlossen, jedoch können Valenzbandzuständen indirekt über die Wechselwirkung mit den cb-artigen Bändern Beimischungen von N-artigen Bändern zukommen.

Das Diagonalelement H_{N} enthält den Energiewert des lokalen Stickstoffzustands im vorliegenden III-V-Halbleiterwirtskristall und wird für die spezifische Zusammensetzung des Ga(NAsP)-Materials linear aus der Lage des Stickstoffniveaus in den beteiligten binären Komponenten interpoliert. Für die Simulationen wird ein Wert von 1.67 eV in GaAs [135] und 2.18 eV in GaP [136] verwendet. Zudem wird eine Verschiebung des Stickstoffniveaus durch kompressive Verspannungseffekte berücksichtigt, die sich aufgrund der Differenz der Gitterkonstanten aufbauen, wenn das Ga(NAsP)-Material pseudomorph auf GaP abgeschieden wird. Um die Modifikation für den Energiewert der Stickstoffzustände abzuschätzen, wird zunächst aus der hydrostatischen Verschiebung der ungestörten Leitungs- und Valenzbänder, die aus den bekannten hydrostatischen Deformationspotentialen und Verspannungskoeffizienten für Ga(AsP) gewonnen werden können [15], der vorliegende Druck abgeleitet, wobei für die Umrechnung ein Koeffizient von 11.1 meV/kbar [137] verwendet wird. Die Abhängigkeit des Stickstoffniveaus vom hydrostatischen Druck wird mit einem Wert von 4 meV/kbar [138] bemessen, so dass davon ausgehend die induzierte Verschiebung des Stickstoffbandes ermittelt werden kann.

Darüber hinaus wird in der Bandstrukturechnung angenommen, dass der Energiewert der lokalen Stickstoffzustände und der der ungestörten Leitungs- und Valenzbänder, die in die diagonalen Matrixelemente H_{N} und H_{cb} einfließen, linear mit dem Stickstoffgehalt x variieren, d. h.

$$E_{\text{N}} = E_{\text{N},0} - \gamma x \quad \text{und} \quad E_{\text{cb}} = E_{\text{cb},0} - \alpha x, \quad (5.3)$$

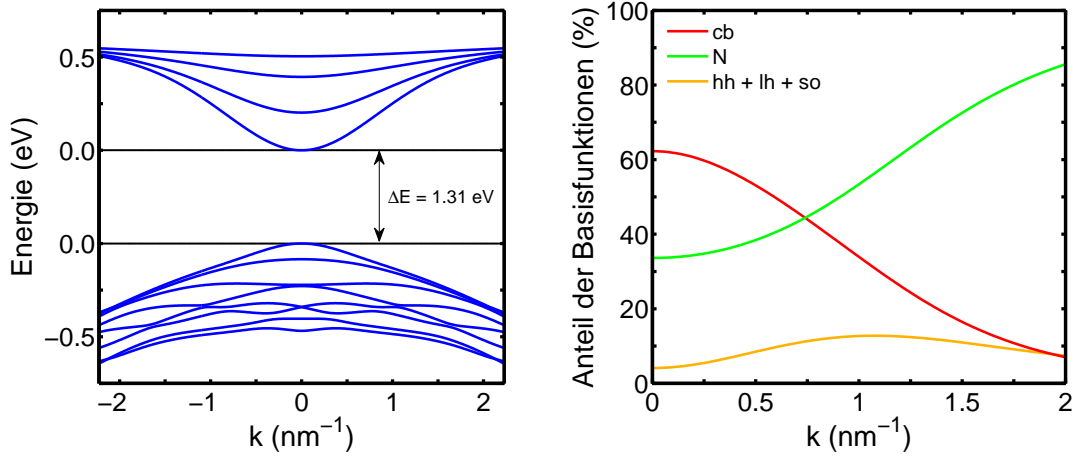


Abbildung 5.2.: (links) Elektronische Bandstruktur für einen 5 nm breiten $\text{Ga}(\text{N}_{0.04}\text{As}_{0.90}\text{P}_{0.06})/\text{GaP}$ -Quantenfilm bei einer Temperatur von 300 K, wobei BAC-Parameter von $\alpha = -3.5$ eV, $\beta = 2.3$ eV und $\gamma = 0$ eV eingesetzt worden sind. Für die Lage des Stickstoffniveaus $E_{\text{N},0}$ fließt ein Wert von 1.894 eV ein, der sich aus einer linearen Interpolation der Werte für GaAs und GaP ergibt und zudem eine verspannungsinduzierte Verschiebung von 0.258 eV einrechnet. (rechts) Zugrunde liegende Entwicklungskoeffizienten der elektronischen Eigenzustände für das tiefste Elektronssubband nach der Zerlegung in die so-, hh-, lh-, cb-, und N-artige Basisfunktionen.

wobei die Größen $E_{\text{N},0}$ und $E_{\text{cb},0}$ jeweils die Energiewerte unter Berücksichtigung der Verspannung einrechnen. Die BAC-Parameter γ und α bestimmen die Variation der Energiewerte mit der Stickstoffkonzentration und charakterisieren zusammen mit dem BAC-Parameter β (Gl. 5.2) die Kopplung zwischen ungestörten Leitungsbändern und den Stickstoffbändern. Die BAC-Parameter α , β und γ müssen letztendlich aus experimentellen Untersuchungen extrahiert werden.

5.2.2. Auswertung der elektronischen Bandstruktur

Die Erweiterung der $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Matrix (Gl. 5.1) erlaubt nun, die Energiedispersion für ein Ga(NAsP)-basiertes Quantenfilmsystem zu berechnen. Abb. 5.2 (links) zeigt die Ergebnisse für einen 5 nm breiten Quantenfilm aus $\text{Ga}(\text{N}_{0.04}\text{As}_{0.90}\text{P}_{0.06})$, der von GaP-Barrieren umschlossen ist, bei einer Temperatur von 300 K. Das Beispiel verdeutlicht, dass sich viele Elektronsubbänder ausbilden, die sich aufgrund der Quantisierung ergeben und dem E_- -Band zuzuordnen sind. Entsprechende Zustände des E_+ -Bandes liegen bei höheren Energien und spielen für die angestellten Untersuchungen keine Rolle.

Die berechneten Elektronsubbänder der stickstoffhaltigen Struktur zeichnen sich gegenüber konventionellen III-V-Halbleitersystemen durch ihre geringe Krümmung aus, aus der sich eine relativ große effektive Elektromasse am Γ -Punkt ableiten lässt. Bei hoher Energie verlaufen die Subbänder immer flacher; dieser Aspekt erklärt sich gerade durch die Kopplung an das Stickstoffniveau, das in der Struktur unter Berücksichtigung der Verspannung bei einem Wert von

1.894 eV liegt.

Die BAC-Wechselwirkung wird auch bei der Analyse der Zusammensetzung der einzelnen Elektronsubbänder deutlich, wie exemplarisch in Abb. 5.2 (rechts) für das tiefste Elektronsubband dargestellt ist. Während am Γ -Punkt die cb-artigen Anteile dominieren, nimmt der Stickstoffcharakter mit wachsendem Wellenvektor mehr und mehr zu. Ab einem Wellenvektor von 0.75 nm^{-1} überwiegt schließlich der N-artige Anteil, d. h. in diesem Bereich wechselt der Charakter.

Auf der Basis der elektronischen Bandstruktur können nun optische Eigenschaften berechnet werden. Dabei reduzieren N-artige Beimischungen die Oszillatorstärke von Übergängen, denn aufgrund der starken Lokalisierung weisen die N-Basisfunktionen mit den ausgedehnten Zuständen des Ga(AsP)-Systems einen geringen Überlapp auf. Dementsprechend wird in den Simulationen den optischen Dipolmatrixelementen von N- mit den übrigen Basisfunktionen ein Wert von 0 zugeordnet.

5.2.3. Einfluss des stickstoffartigen Charakters für die elektronische Zustandsdichte

Mit der Erweiterung der $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Matrix durch die Einführung N-artiger Komponenten im Rahmen des BAC-Modells wird die elektronische Zustandsdichte des Ga(NAsP)-Systems zunächst überschätzt, denn der Ansatz setzt voraus, dass durch den Einbau einer vergleichsweise geringen Anzahl lokalisierter Stickstoffatome ein zusätzliches Band entsteht. Da jedes Stickstoffatom tatsächlich ein Arsen- oder Phosphoratom ersetzt, bringt die stickstoffinduzierte Aufspaltung in E_- - und E_+ -Bänder also eine gegenüber dem Ga(AsP)-System unphysikalische Verdopplung der elektronischen Zustandsdichte im Bereich der Leitungsbandkante mit sich.

Um Auswirkungen der überzähligen Zustände auf die optischen Eigenschaften zu unterdrücken, wird ein Kriterium entwickelt, mit dem die Besetzung der elektronischen Zustände korrigiert wird. So soll die Besetzung je nach Komposition des elektronischen Zustands gewichtet werden, also in Abhängigkeit davon, durch welche Basisfunktionen der Zustand bestimmt wird. Zu diesem Zweck bringt man in die Beschreibung der Verteilung der Ladungsträger auf die Zustände einen Faktor ein, der durch den N-artigen Anteil des Zustands festgelegt ist. Zeichnet sich der Zustand beispielsweise durch einen überwiegend N-artigen Charakter aus, so wird seine Besetzung im gleichen Maße verringert. Auf diese Weise wird die Anzahl der Zustände, die für eine Besetzung mit Ladungsträgern zur Verfügung stehen, auf die Anzahl reduziert, die durch die Ga(AsP)-Halbleitermatrix vorgegeben ist.

Die Korrektur der Verteilungsfunktion wirkt sich speziell auf die optischen Eigenschaften unter Anregungsbedingungen aus, die im Hinblick auf Laseranwendungen von Interesse sind. Abb. 5.3 illustriert die Situation am Beispiel der Quantenfilmstruktur aus Kapitel 5.2.2 für eine Ladungsträgerdichte von $5 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-2}$. Mit der eingeführten Gewichtung verschiebt sich das chemische Potential für die Elektronen zu deutlich höheren Energien, so dass die Verteilung der Ladungsträger auf die Elektronsubbänder signifikant modifiziert wird (Einfügung in Abb. 5.3). Während die Verteilungsfunktion für Zustände des tiefsten Elektronsubbands im Fall ohne Gewichtung am

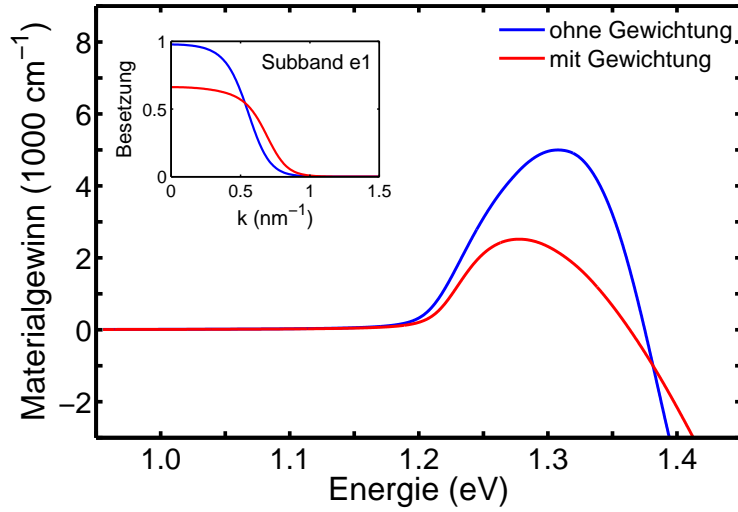


Abbildung 5.3.: Materialgewinnspektrum für einen 5 nm breiten $\text{Ga}(\text{N}_{0.04}\text{As}_{0.90}\text{P}_{0.06})/\text{GaP}$ -Quantenfilm bei einer Temperatur von 300 K und einer Ladungsträgerdichte von $5 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, das sich ohne (blaue Linie) und mit (rote Linie) Gewichtung der Ladungsträgerverteilung je nach Zusammensetzung der elektronischen Zustände ergibt. Die Einfügung zeigt die zugrunde liegenden Verteilungsfunktionen für die Ladungsträger im tiefsten Elektronsubband. In den Simulationen sind BAC-Parameter von $\alpha = -3.5 \text{ eV}$, $\beta = 2.3 \text{ eV}$ und $\gamma = 0 \text{ eV}$ angenommen.

Γ -Punkt Werte von nahezu 1 annimmt, ergibt sich mit Gewichtung eine Reduktion auf 0.66, was gerade dem N-artigen Anteil der Zustände in diesem Bereich entspricht (Abb. 5.2 (rechts)). Mit der verringerten Besetzung an der Subbandkante vergrößert sich gleichzeitig die Besetzung von Zuständen mit höheren Energiewerten. Insgesamt führt die Abstimmung der Ladungsträgerbesetzung auf die Komposition der Zustände also zu einer Verbreiterung der Verteilungsfunktion.

Die Unterschiede zeigen sich insbesondere im optischen Materialgewinn, der für beide Situationen mit Hilfe der Halbleiter-Bloch-Gleichungen (Kapitel 2.2.1) ermittelt wird. So ergibt sich nach der Korrektur der Verteilungsfunktion ein entsprechend verbreitertes Spektrum mit reduzierter Gewinnamplitude (Abb. 5.3). Die Stärke der Änderung hängt speziell davon ab, welche Ladungsträgerdichte vorgegeben wird. Solange keine nennenswerte Anregung vorliegt, sind die Abweichungen der Spektren minimal, die Auswirkungen nehmen aber mit wachsender Ladungsträgerdichte zu.

5.2.4. Emissionswellenlänge und BAC-Parameter

Um den starken Einfluss der Stickstoffbeimischung auf die Bandlücke des Ga(NAsP)-basierten Materialsystems zu demonstrieren, wird eine Serie von Lumineszenzspektren auf der Basis der Halbleiter-Lumineszenz-Gleichungen (Kapitel 2.3.1) berechnet. Für die Simulationen wird eine Quantenfilmstruktur wie in Kapitel 5.2.2 mit variierendem Stickstoffgehalt von 2 bis 6 % gewählt, und es werden BAC-Parameter von $\alpha = -3.5 \text{ eV}$, $\beta = 2.3 \text{ eV}$ und $\gamma = 0 \text{ eV}$ [139] verwendet.

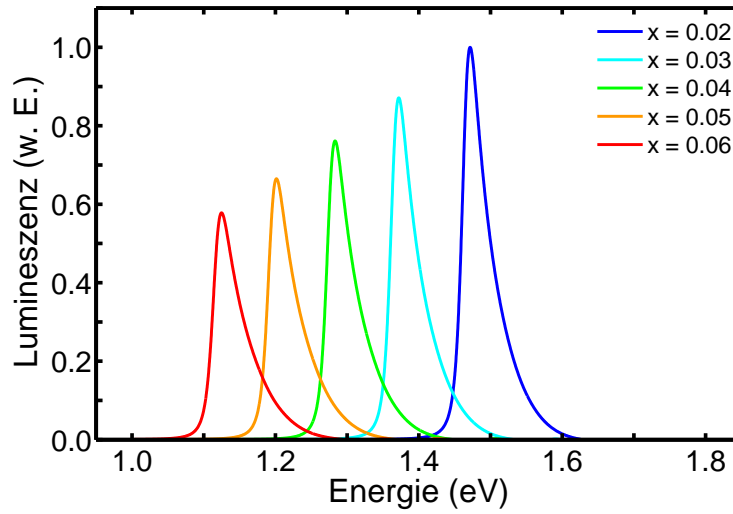


Abbildung 5.4.: Lumineszenzspektren von 5 nm breiten $\text{Ga}(\text{N}_x\text{As}_{0.94-x}\text{P}_{0.06})/\text{GaP}$ -Quantenfilmstrukturen mit Stickstoffkonzentrationen (x) von 2, 3, 4, 5 und 6 %. Die Simulationen sind bei einer Temperatur von 300 K und einer Ladungsträgerdichte von $1 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ durchgeführt, wobei BAC-Parameter von $\alpha = -3.5 \text{ eV}$, $\beta = 2.3 \text{ eV}$ und $\gamma = 0 \text{ eV}$ eingesetzt worden sind.

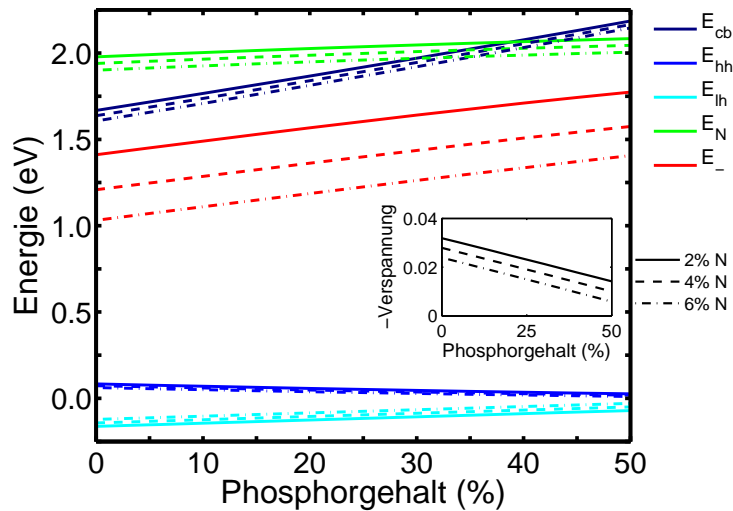


Abbildung 5.5.: Abhängigkeit der Bandlücke von der Stickstoff- und Phosphorkonzentration für das $\text{Ga}(\text{NAsP})$ -Material, die man mit dem BAC-Parametersatz $\alpha = -3.5 \text{ eV}$, $\beta = 2.3 \text{ eV}$ und $\gamma = 0 \text{ eV}$ erhält. Gewählt sind Stickstoffkonzentrationen von 2 % (durchgezogene Linien), 4 % (gestrichelte Linien) und 6 % (gestrichelt-gepunktete Linien). Eingezeichnet sind das hh- und lh-artige Valenzband sowie das cb- und N-Band, aus denen das E_- -Band ermittelt wird. Dargestellt sind die Ergebnisse bei einer Temperatur von 300 K unter Berücksichtigung einer Verspannung auf GaP. Die verspannungsinduzierte Energieverschiebung der einzelnen Bandkanten hängt insbesondere von der relativen Differenz der Gitterkonstanten zwischen $\text{Ga}(\text{NAsP})$ und GaP ab, die in der Einfügung als Funktion der chemischen Zusammensetzung angegeben ist.

Die Ergebnisse zeigen, dass mit der Einstellung des Stickstoffgehalts Emissionswellenlängen über einen großen Bereich im Infraroten erzielt werden (Abb. 5.4); es lässt sich eine Rotverschiebung des Lumineszenzsignals von fast 100 meV pro Prozent Stickstoff ableiten. Die empirischen BAC-Parameter sind vom GaAs-basierten Ga(NAs)-Materialsystem übernommen worden und bestimmen die stickstoffinduzierte Änderung der Emissionswellenlänge maßgeblich. Optimierte BAC-Parameter aus spektroskopischen Experimenten können deshalb die Genauigkeit der Beschreibung für das Ga(NAsP)-Materialsystem verbessern. Neben den empirischen Werten für α , β und γ ist auch die energetische Lage des Stickstoffniveaus ein empfindlicher Parameter. Abb. 5.5 gibt einen Überblick über die Abhängigkeit der Bandlücke von der Stickstoff- und Phosphorkonzentration im Fall des auf GaP verspannten Ga(NAsP)-Materials, die man mit dem in der Analyse verwendeten BAC-Parametersatz erhält.

5.3. Elektromodulierte Reflexion

Die Einbindung des Einflusses von Stickstoff in die theoretische Beschreibung ermöglicht es, die elektromodulierte Reflexion (ER) einer Ga(NAsP)-basierten Probenserie zu modellieren, und es kann ein Vergleich mit experimentellen Spektren angestellt werden. Auf diese Weise lässt sich überprüfen, inwieweit das Modell zur Beschreibung der optoelektronischen Eigenschaften des Ga(NAsP)-Materialsystems geeignet ist.

5.3.1. Methode der elektromodulierten Reflexion

Für die Untersuchung wird ein Verfahren der Modulationsspektroskopie gewählt, denn damit lassen sich spezifische Eigenschaften der elektronischen Bandstruktur eines Systems aufdecken. In Kapitel 4.2 wurde bereits das Leistungsvermögen der photomodulierten Reflexion (PR) zur Charakterisierung von Quantenfilmstrukturen diskutiert. Ebenso geeignet für eine eingehende Analyse ist die Methode der ER, bei der die Reflektivität nicht wie bei der PR durch eine optische Anregung der Struktur sondern durch ein elektrisches Feld, das in Wachstumsrichtung der Probe angelegt wird, moduliert wird [140, 141, 142]. In diesem Fall wird also die feldinduzierte Änderung des Reflexionsvermögens der Struktur aufgenommen.

Um ein ER-Spektrum zu berechnen, wird zunächst die frequenzabhängige optische Suszeptibilität des Quantenfilms für verschiedene Feldsituationen mit Hilfe der Halbleiter-Bloch-Gleichungen ermittelt. Abb. 5.6 (oben) zeigt den Real- und Imaginärteil der resultierenden dielektrischen Funktion exemplarisch für einen 5.3 nm breiten Ga(N_{0.02}As_{0.84}P_{0.14})-Quantenfilm, den Barrieren aus GaP umgeben, bei niedriger Ladungsträgerdichte für eine Temperatur von 50 K im feldfreien Fall. Die Spektren zeichnen sich im betrachteten Energiebereich speziell durch drei exzitonische Resonanzen aus, die verursacht sind von optischen Übergängen zwischen dem tiefsten Elektron- und dem tiefsten Lochsubband (e1-h1), zwischen dem zweitiefsten Elektron- und dem zweitiefsten Lochsubband (e2-h2) sowie zwischen dem tiefsten Elektron- und dem viertiefsten (dies ist das erste mit vorwiegendem lh-Charakter) Lochsubband (e1-h4). Für die jeweils

beteiligten Wellenfunktionen kann aufgrund ihrer Symmetrie gerade ein großer räumlicher Überlapp gefolgert werden, aus dem sich hohe optische Dipolmatrixelemente am Γ -Punkt ergeben, was die Oszillatorstärke der genannten Übergänge erklärt. Dies führt schließlich zu charakteristischen Resonanzen im Absorptionsspektrum, das durch den Imaginärteil bestimmt ist, sowie zu frequenzabhängigen Modifikationen des Brechungsindex, die dem dispersiven Signalverlauf des Realteils folgen.

Gibt man nun ein elektrisches Feld in Wachstumsrichtung der Quantenfilmstruktur vor, so verkippt der Potentialverlauf für Elektronen und Löcher, was eine Rotverschiebung aller Übergangsenergien bewirkt. Zudem bilden die Wellenfunktionen aufgrund des zusätzlichen, in Wachstumsrichtung linear ansteigenden Potentials asymmetrische Formen aus, die die Aufenthaltswahrscheinlichkeit für Elektronen und Löcher zu entgegengesetzten Seiten des Quantenfilms verschieben. Damit überlappen die Wellenfunktionen diagonalen Übergänge, wie z. B. die e1- und h1-Wellenfunktion, weniger, und der Übergang verliert an Oszillatorstärke im Vergleich zum feldfreien Fall. Dagegen wächst mit zunehmendem Feld der Überlapp für die e2- und h1- oder die e1- und h2-Wellenfunktion, d. h. die ehemals verbotenen Übergänge gewinnen an Oszillatorstärke. Die Rotverschiebung der Übergangsenergien und die Umverteilung von Oszillatorstärke sind als *Quantum confined Stark effect* (QCSE) bekannt [143].

Da die dielektrische Funktion, speziell ihr Realteil, die Brechungsindexdispersion des Quantenfilms festlegt, zeigen sich die verschiedenen Interbandübergänge auch im Reflektivitätsspektrum, das aufgrund des Brechungsindexkontrastes von Barrieren- und Quantenfilmmaterial entsteht. Zur Berechnung der Reflektivität wird die Fresnel-Formel (Gl. 4.1) angewendet, wobei die GaP-Barrieren durch einen konstanten Brechungsindex n_B von 3.18 [14] beschrieben werden. Die Brechungsindexdispersion $n(\omega)$ des Quantenfilms rechnet einen Hintergrundbrechungsindex n_H von 3.62 [14] ein und wird nach Gl. 2.20 unter Berücksichtigung der mikroskopisch berechneten Suszeptibilität für verschiedene Feldsituationen ausgewertet. Die Linienform des resultierenden Reflektivitätsspektrums ergibt sich aus einem breiten Untergrund, der von kleinen Signalen der verschiedenen Interbandübergänge überlagert wird. Da die Signaturen dieser kritischen Punkte durch den Verlauf des Realteils der dielektrischen Funktion geprägt werden, zeichnen sie sich ebenso durch eine dispersive Form mit einem Maximum zur niederenergetischen und einem Minimum zur hochenergetischen Seite hin aus.

Das ER-Spektrum kann nun ermittelt werden, indem man die Reflektivitätsspektren für zwei verschiedenen große elektrische Felder in der Quantenfilmregion berechnet und anschließend voneinander subtrahiert. Auf diese Weise wird der Untergrund unterdrückt, die kritischen Punkte aber werden durch die Ausbildung charakteristischer Signale betont. Abb. 5.6 (unten) zeigt das differentielle Spektrum, das man nach Gl. 4.2 für eine Feldmodulation von 30 kV/cm erhält, und illustriert das Zustandekommen der Linienform des ER-Spektrums mit den typischen Merkmalen für die Rotverschiebung der Übergangsenergien (Einfügung i), den Gewinn von Oszillatorstärke (Einfügung ii) und den Verlust von Oszillatorstärke (Einfügung iii). Das ER-Spektrum des $\text{Ga}(\text{N}_{0.02}\text{As}_{0.84}\text{P}_{0.14})$ -Quantenfilmsystems gibt beispielsweise den e1-h2-Übergang, der mit elektrischem Feld an Oszillatorstärke gewinnt, durch eine Signalform wie in (ii) bei einer Energie von 1.664 eV deutlich zu erkennen ist. Offensichtlich treten auch gemischte Formen auf, z. B.

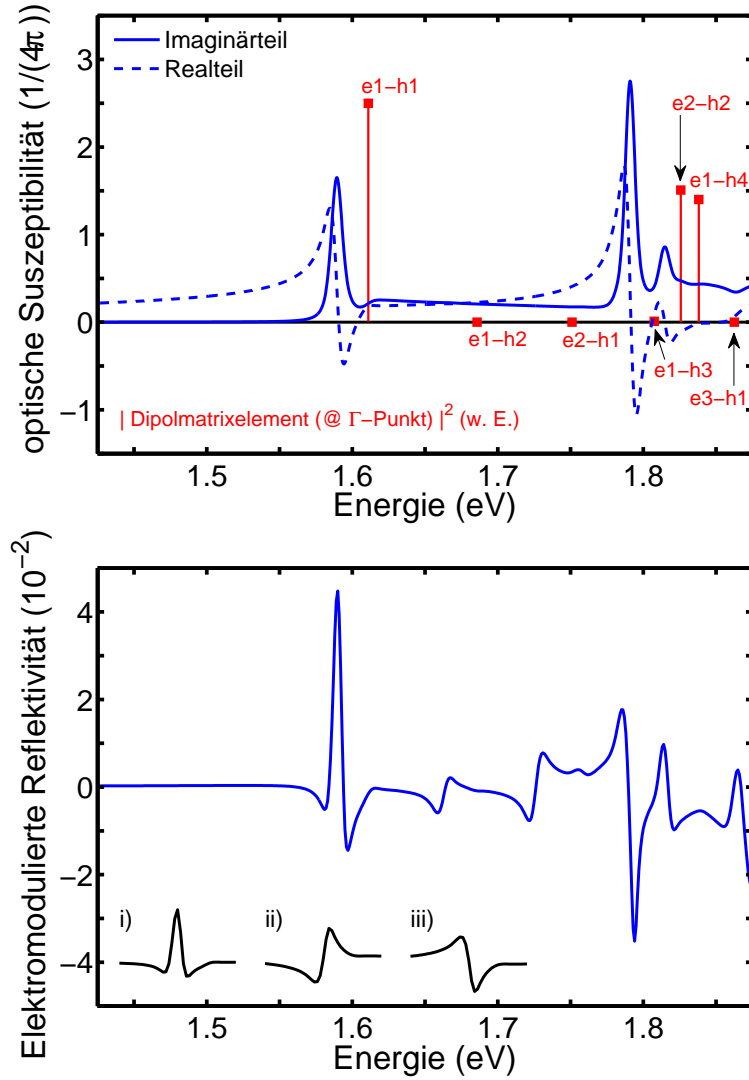


Abbildung 5.6.: (oben) Imaginärteil (durchgezogene Linie) und Realteil (gestrichelte Linie) der optischen Suszeptibilität eines 5.3 nm breiten $\text{Ga}(\text{N}_{0.02}\text{As}_{0.84}\text{P}_{0.14})$ -Quantenfilms mit GaP-Barrieren bei einer Temperatur von 50 K und einer Ladungsträgerdichte von $2 \cdot 10^9 \text{ cm}^{-2}$, wobei BAC-Parameter von $\alpha = -3.5 \text{ eV}$, $\beta = 2.3 \text{ eV}$ und $\gamma = 0 \text{ eV}$ verwendet wurden. Die roten Balken zeigen die Oszillatorstärke (in w. E.) der verschiedenen Interbandübergänge am Γ -Punkt an. Aus den Spektren der optischen Suszeptibilität lässt sich schließlich die Brechungsindexdispersion der Quantenfilmschicht ableiten. (unten) ER-Spektrum einer Quantenfilm-Barriere-Grenzfläche, das man aus der Differenz zweier Reflektivitätsspektren für verschieden große elektrische Felder in der Quantenfilmstruktur erhält. Während die Barrierenschicht durch einen konstanten Brechungsindex beschrieben wird, geht für die Quantenfilmschicht die mikroskopisch berechnete Brechungsindexdispersion ein, die sich durch eine externe Spannung, die in Wachstumsrichtung der Struktur angelegt wird, verändert. In der Simulation ist eine Feldmodulation von 30 kV/cm angenommen. Die Einfügung zeigt die Linienform des differentiellen Spektrums für eine Rotverschiebung (i), eine Zunahme an Oszillatorstärke (ii) und eine Abnahme an Oszillatorstärke (iii).

äußert sich die Rotverschiebung des e1-h1-Übergangs in einer Form wie in (i), die aufgrund des gleichzeitigen Verlusts von Oszillatorstärke einer Form wie in (iii) überlagert wird, was den asymmetrischen Verlauf erklärt. Die Linienform eines ER-Spektrums zeigt somit sensibel an, wie die Oszillatorstärken der verschiedenen Interbandübergänge miteinander korrelieren.

Starke Korrelationen finden sich gerade im Energiebereich um 1.8 eV, da die Interbandübergänge hier energetisch dicht liegen und sich die einzelnen Signaturen zu komplizierten Formen überlagern. Die Korrelation der Oszillatorstärken der verschiedenen Interbandübergänge ist hier so stark, dass sie sich mit einer konventionellen Analyse der Linienform nicht auflösen lässt. Diese konventionellen Verfahren bestehen darin, den im Spektrum auftretenden Signaturen, die Interbandübergänge vermuten lassen, unabhängige Oszillatoren zuzuordnen, die mehrere freie Parameter enthalten [144]. Die mikroskopische Theorie hingegen analysiert die Linienform intrinsisch.

5.3.2. Vergleich theoretischer und experimenteller elektromodulierter Reflektivitätsspektren

Die berechneten Spektren werden experimentellen Ergebnissen¹ gegenübergestellt, die mit der Technik der kontaktlosen Elektroreflexion gewonnen worden sind. Dabei wird die Probe in einen Kondensator gebracht, so dass in Wachstumsrichtung der Probe eine Wechselspannung mit einer Amplitude von etwa 3000 V angelegt werden kann, die das interne elektrische Feld in der Quantenfilmregion moduliert. Nähere Informationen zum experimentellen Aufbau findet man in [145]. Der Untersuchung liegen Proben² zugrunde, die jeweils drei Ga(NAsP)-Quantenfilme enthalten und auf einem GaP-Substrat abgeschieden sind. Separiert sind die Quantenfilme durch etwa 100 nm breite Barrierenschichten aus GaP, die eine Kopplung der elektronischen Wellenfunktionen benachbarter Quantenfilme ausschließen.

Die verschiedenen Grenzflächen der Schichtenfolge beeinflussen die Reflektivität und werden allgemein im Transfermatrixformalismus (Kapitel 2.2.2) erfasst, der die Lichtpropagation innerhalb der Struktur beschreibt. Da das differentielle Reflektivitätsspektrum aber speziell die feldinduzierte Änderung der optischen Antwort der Quantenfilmschichten wiedergibt, kann man die Simulationen auf ein einzelnes Barrieren-Quantenfilm-Schichtpaar beschränken. Das resultierende ER-Spektrum unterscheidet sich von den Ergebnissen, die sich mit den drei Quantenfilmen unter Berücksichtigung der dielektrischen Umgebung im Rahmen der Transfermatrixmethode ergeben, nur in der Skalierung, die für die Analyse unbedeutend ist.

Außerdem ist anzumerken, dass im Experiment die einfallende Lichtwelle unter einem Winkel von 45° auf die Probenoberfläche trifft, woraus sich mit dem Brechungsgesetz nach Snellius [97] für Grenzflächen innerhalb der Struktur ein Einfallswinkel von 11° ergibt. Entsprechende Si-

¹Die elektromodulierten Reflektivitätsspektren sind experimentell von C. Karcher und W. Heimbrod (Philipps-Universität Marburg) aufgenommen worden.

²Die Proben sind von B. Kunert, K. Volz und W. Stolz (NAsP_{III/V} GmbH und Philipps-Universität Marburg) mittels metallorganischer Gasphasenepitaxie hergestellt worden.

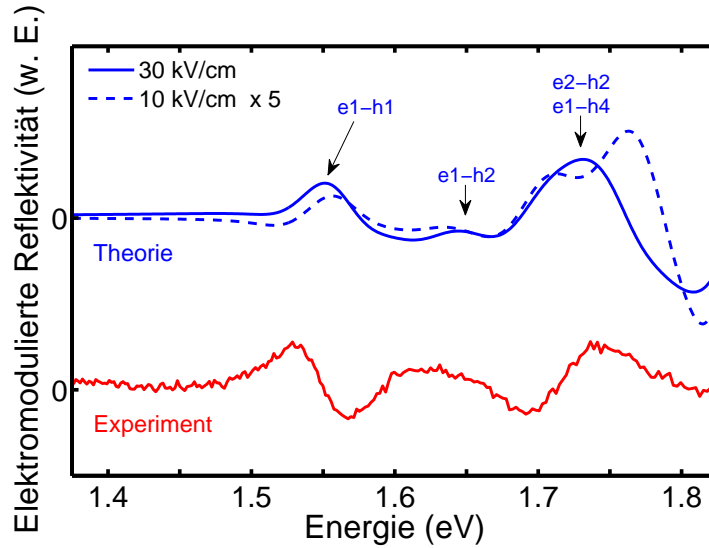


Abbildung 5.7.: Vergleich des modellierten (blaue Linien) und gemessenen (rote Linie) ER-Spektrums einer Quantenfilmstruktur (Probe 23388) bei einer Temperatur von 50 K. Für die Simulation sind Reflektivitätsspektren eines Barrieren-Quantenfilm-Schichtpaares für unterschiedliche Feldsituationen berechnet worden. Dargestellt sind die Ergebnisse unter der Annahme einer Feldmodulation von 30 kV/cm (blaue durchgezogene Linie) und einer Feldmodulation von 10 kV/cm (blaue gestrichelte Linie), skaliert mit einem Faktor von 5. Die zugrunde liegenden Suszeptibilitätsspektren des 5.3 nm breiten $\text{Ga}(\text{N}_{0.02}\text{As}_{0.84}\text{P}_{0.14})/\text{GaP}$ -Quantenfilms sind mit BAC-Parametern von $\alpha = -3.5$ eV, $\beta = 2.3$ eV und $\gamma = 0$ eV für eine Ladungsträgerdichte von $2 \cdot 10^9 \text{ cm}^{-2}$ ermittelt, mit 35 meV inhomogen verbreitert und um 35 meV zu niedrigeren Energien verschoben worden. Das experimentelle Spektrum ist von C. Karcher und W. Heimbrod (Philipps-Universität Marburg) an einer von B. Kunert, K. Volz und W. Stolz (NAsP_{III/V} GmbH und Philipps-Universität Marburg) hergestellten Probe aufgenommen worden. Die Ergebnisse sind vertikal versetzt dargestellt.

mulationen zeigen, dass die ER nur minimal von den Ergebnissen für den senkrechten Einfall abweicht. Aus diesem Grund können für den Vergleich mit der Messung Berechnungen herangezogen werden, die man für die vereinfachte Situation erhält, dass eine Lichtwelle senkrecht auf eine Quantenfilm-Barriere-Grenzfläche fällt.

Abb. 5.7 vergleicht das experimentelle ER-Spektrum von der Struktur, der ein Quantenfilm wie in Kapitel 5.3.1 zugrunde liegt (Probe 23388), mit modellierten Spektren. Um Unordnungsercheinungen zu simulieren, werden die mikroskopischen Spektren des Systems (Abb. 5.6 (oben)) für den Vergleich durch eine Gauß-Funktion mit einer Halbwertsbreite von 35 meV inhomogen verbreitert, so dass sich die Signaturen im theoretischen Spektrum gerade den gemessenen Formen anpassen. Der Wert liegt deutlich über den Halbwertsbreiten, die für die (AlGaIn)As- und (AlGaIn)(AsSb)-basierten Strukturen eingesetzt worden sind und typischerweise zwischen 8 und 20 meV liegen (Kapitel 3 und Kapitel 4). Dieser Aspekt gibt also die Bedeutsamkeit der Unordnung im verdünnt stickstoffhaltigen Materialsystem zu erkennen.

Die blaue durchgezogene Linie in Abb. 5.7 zeigt das theoretische Spektrum, das sich ergibt, wenn man das Reflektivitätsspektrum bei einem elektrischen Feld von 30 kV/cm von dem Spektrum im feldfreien Fall subtrahiert. Generell ist die Größe der einzusetzenden Felder durch die

Summe bzw. Differenz von internem elektrischen Feld und Modulationsfeld gegeben, was gerade der experimentellen Realisierung entspricht. Geht man davon aus, dass die gesamte angelegte Spannung gleichmäßig über die Probe abfällt, kann die Feldmodulation F über den Zusammenhang $F = U/l$ abgeschätzt werden, wobei l die Probenlänge (0.1 cm) bezeichnet und für U die Modulationsspannung (3000 V) eingesetzt wird. Unter dieser Annahme ergibt sich ein Wert von 30 kV/cm.

Möglicherweise wird die externe Spannung aber durch Ladungen an Oberflächen und internen Grenzflächen abgeschirmt, so dass sie nicht gleichmäßig über der Probe abfällt, sondern zu einer Schwankung des elektrischen Feldes in unterschiedlichen Regionen der Probe führt. Um diese Situation zu untersuchen und die Auswirkung auf das ER-Spektrum zu prüfen, wird exemplarisch eine Berechnung für eine verminderte Feldmodulation von 10 kV/cm durchgeführt (Abb. 5.7, blaue gestrichelte Linie). Dabei zeigen sich Signalamplituden, die fünfmal schwächer sind als unter der Annahme einer Feldmodulation von 30 kV/cm. Dieser Unterschied begründet sich mit der kleineren Differenz der Reflektivitätsspektren, die für die Simulation der niedrigeren Feldmodulation heranzuziehen sind, denn mit sinkendem elektrischen Feld nimmt die Umverteilung von Oszillatorstärke und die Rotverschiebung der Übergangsenergien ab. Deswegen beobachtet man bei verminderter Feldmodulation zum einen eine kleinere Amplitude der Signale und zum anderen werden die Signale weniger verbreitert. Für die Analyse spielt die Skalierung aber keine Rolle. Vielmehr ist entscheidend, dass die Linienform offensichtlich weitgehend unabhängig von der Wahl der Feldmodulation ist. So kann die mikroskopische Theorie zur Interpretation der experimentellen Spektren genutzt werden, ohne dass der Wert der tatsächlichen Feldmodulation in der Quantenfilmregion genau bekannt sein muss.

Insgesamt lassen sich mit dem mikroskopischen Modell wesentliche Merkmale des experimentellen Spektrums wiedergeben. Zwar sind die theoretischen Spektren in der Darstellung um 35 meV zu niedrigeren Energien verschoben, aber offensichtlich werden die drei Resonanzen, die im Experiment beobachtet werden (um 1.53 eV, 1.63 eV und 1.74 eV), reproduziert und auch ihr energetischer Abstand stimmt mit den experimentellen Daten weitgehend überein. Durch den Vergleich der berechneten und gemessenen Spektren gelingt es schließlich, den Ursprung der Signaturen aufzuklären und Rückschlüsse auf die elektronische Bandstruktur zu ziehen. So kann das erste ER-Signal e1-h1-Übergängen zugeordnet werden, das zweite ER-Signal charakterisiert e1-h2-Übergänge, die zunächst verboten sind, mit wachsendem elektrischen Feld aber Oszillatorstärke gewinnen, und das dritte ER-Signal wird durch eine Vielzahl verschiedener Übergänge geprägt, zu denen e2-h2- und e2-h4-Übergänge zählen.

5.3.3. Ergebnisse für weitere Probenstrukturen

Der Vergleich von modellierten und gemessenen ER-Spektren ist in Abb. 5.8 für die gesamte Probenserie im Überblick dargestellt. Die fünf Proben unterscheiden sich in der Breite und chemischen Zusammensetzung des Quantenfilms: Die Breiten liegen zwischen 5.0 und 6.7 nm und die Stickstoffkonzentration wird von 2 bis 6 % variiert.

Die berechneten ER-Spektren für die drei Strukturen mit den niedrigsten Stickstoffbeimischungen im Quantenfilmmaterial sind durch drei Signaturen geprägt, die auch experimentell nachgewiesen werden (Probe 23385, 23388 und 23387). Insgesamt lässt sich mit dem mikroskopischen Modell also nicht nur für den 5.3 nm breiten Ga(N_{0.02}As_{0.84}P_{0.14})-Quantenfilm, der in Kapitel 5.3.2 im Zentrum der Betrachtung stand, sondern auch für den 5.6 nm breiten Ga(N_{0.02}As_{0.84}P_{0.14})-Quantenfilm und den 5 nm breiten Ga(N_{0.03}As_{0.92}P_{0.05})-Quantenfilm eine qualitative Übereinstimmung der theoretischen und experimentellen ER-Spektren erreichen. Die Abweichungen in der Linienbreite zu höheren Energien hin sind darauf zurückzuführen, dass die inhomogene Verbreiterung in den Simulationen über den gesamten Energiebereich mit 35 meV als konstant angenommen wird. Tatsächlich nimmt sie aber zu, denn Unordnungserscheinungen wie Fluktuationen der Topfbreite betreffen höhere Interbandübergänge i. A. mehr als die Übergänge, an denen energetisch tief im Topf liegenden Zustände beteiligt sind. Dieser Aspekt zeigt sich besonders deutlich im Spektrum der Probe 23387, deren Signaturen im Experiment mit zunehmender Energie kleiner und stärker verbreitert erscheinen, als dies im theoretischen Spektrum der Fall ist. Die Unterschiede in den absoluten Positionen zwischen Theorie und Experiment sind auf die Unsicherheiten der Wachstums- und Bandstrukturparameter zurückzuführen.

Mit steigendem Stickstoffanteil im Quantenfilmmaterial zeigen die ER-Spektren der fünf Proben eine Rotverschiebung der e1-h1-Resonanz. Zwar unterscheiden sich die einzelnen Proben auch in ihrer Quantenfilmbreite, aber die Variation der Stickstoffkonzentration in den Strukturen wirkt sich deutlich stärker aus als die Rotverschiebung der Übergangsenergie mit der Quantenfilmbreite. Insgesamt stellt man experimentell eine Abhängigkeit der Übergangsenergie von der Stickstoffkonzentration fest, die schwächer ist als die stickstoffinduzierte Bandlückenreduktion, die theoretisch erwartet wird. Dies weist also darauf hin, dass die BAC-Kopplung in stickstofffreien Strukturen mit den in dieser Analyse gewählten Bandstrukturparametern überschätzt wird.

Zudem unterscheiden sich die berechneten und gemessenen ER-Spektren der beiden stickstoffreichsten Strukturen (Probe 23383 und 23384) auch in ihrer Linienform. Nach der Theorie ergeben sich ausgeprägte Signaturen bei einer Energie um 1.30 eV aufgrund der e1-h1-Resonanz und bei einer Energie um 1.45 eV, die u. a. der e2-h2-Resonanz zuzuordnen ist. Die Übergänge liegen energetisch so dicht, dass die e1-h2-Resonanz, die zwischen ihnen liegt, im ER-Spektrum weitgehend überdeckt wird, wohingegen experimentell drei Signale in einem größeren Abstand aufgelöst werden. Dies unterstreicht die Folgerung, dass die gewählten BAC-Parameter für stickstoffreiche Strukturen nur eingeschränkt geeignet sind, die elektronische Bandstruktur zu beschreiben. Tatsächlich scheint der energetische Abstand der einzelnen Subbänder des Quantenfilms größer zu sein, unter der Annahme, dass die drei genannten Übergänge den drei experimentell aufgenommen Resonanzen zuzuschreiben sind.

Abschließend ist darauf hinzuweisen, dass die Analyse bei einer Temperatur von 50 K vorgestellt worden ist. So kann experimentell nämlich ein verbessertes Signal-Rausch-Verhältnis erreicht werden als bei Raumtemperatur. Die experimentellen ER-Spektren, die bei einer Erhöhung der Temperatur bis zu 300 K aufgenommen worden sind, zeigen aber vergleichbare Linienformen, aus denen die gleichen Resonanzen identifiziert werden können, wobei sie die typische Rotverschiebung der Übergangsenergien mit zunehmender Temperatur erkennen lassen [145].

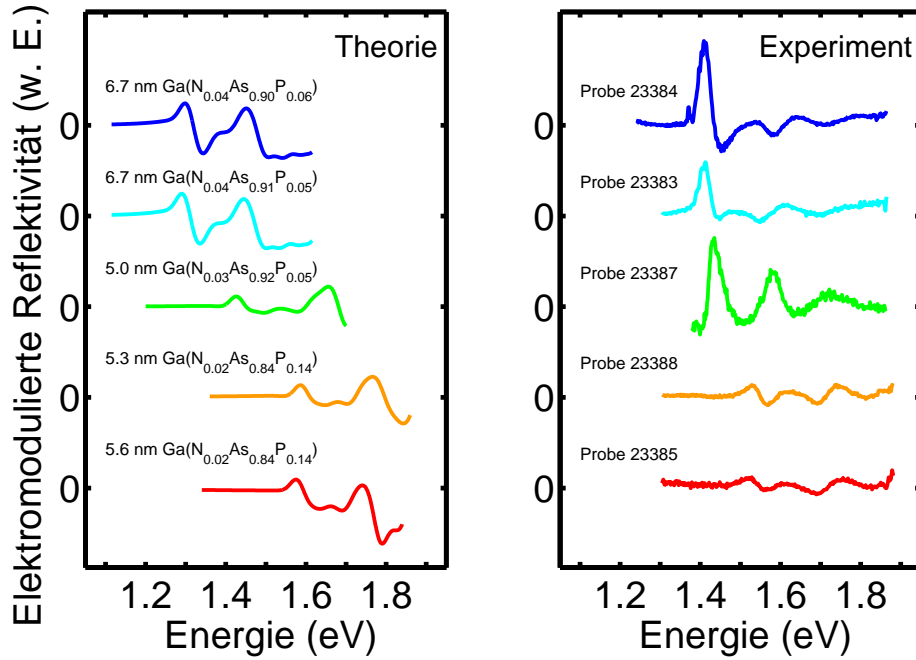


Abbildung 5.8.: Vergleich modellierter (*links*) und gemessener (*rechts*) ER-Spektren von fünf Quantenfilmstrukturen, die sich in der chemischen Zusammensetzung und Breite des Quantenfilms unterscheiden, bei einer Temperatur von 50 K. Für die Simulation sind Reflektivitätsspektren eines Barrieren-Quantenfilm-Schichtpaars für eine Feldmodulation von 30 kV/cm berechnet worden. Die zugrunde liegenden Suszeptibilitätsspektren des $\text{Ga}(\text{NAsP})/\text{GaP}$ -Quantenfilms sind mit BAC-Parametern von $\alpha = -3.5$ eV, $\beta = 2.3$ eV und $\gamma = 0$ eV für eine Ladungsträgerdichte von $2 \cdot 10^9 \text{ cm}^{-2}$ ermittelt und mit 35 meV inhomogen verbreitert worden. Die experimentellen Spektren sind von C. Karcher und W. Heimbrod (Philipps-Universität Marburg) an von B. Kunert, K. Volz und W. Stolz ($\text{NAsP}_{\text{III/V}}$ GmbH und Philipps-Universität Marburg) hergestellten Proben aufgenommen worden. Die Ergebnisse für die verschiedenen Probenstrukturen (23384, 23383, 23387, 23388, 23385) sind vertikal versetzt dargestellt.

5.4. Photolumineszenz und Ladungsträgerverlustmechanismen

Eine weitere Methode zur Charakterisierung des Materialsystems stellen Photolumineszenzuntersuchungen dar. Neben dem direkten Vergleich von modellierten und gemessenen Spektren erlaubt die mikroskopische Analyse der Emissionseigenschaften in Abhängigkeit der Pumpintensität schließlich Rückschlüsse auf die Relevanz der verschiedenen Ladungsträgerverlustmechanismen im System.

5.4.1. Vergleich theoretischer und experimenteller Photolumineszenzspektren

Untersucht wird die Photolumineszenz einer GaP-basierten Quantenfilmstruktur für verschiedene Anregungsintensitäten. Der Quantenfilm besteht aus $\text{Ga}(\text{N}_{0.04}\text{As}_{0.86}\text{P}_{0.10})$, ist 7 nm breit und ist von GaP-Barrieren umschlossen. Davon ausgehend werden Photolumineszenzspektren bei einer Temperatur von 294 K mit Hilfe der Halbleiter-Lumineszenz-Gleichungen ermittelt, so dass ein Vergleich mit Messungen³ möglich wird.

Insgesamt kann eine Übereinstimmung der modellierten Spektren mit den experimentellen Ergebnissen erzielt werden (Abb. 5.9), was für die Eignung der mikroskopischen Theorie für eine realistische Modellierung der Materialklasse spricht. Im betrachteten Anregungsbereich wird die Lumineszenz speziell durch Interbandübergänge zwischen dem tiefsten Elektron- und dem tiefsten Lochsubband dominiert, und so bildet sich im Spektrum ein einzelnes Maximum aus, dessen Amplitude und homogene Verbreiterung mit zunehmender Anregungsintensität wächst. Anzumerken ist, dass die Simulationen für den Vergleich um 29 meV zu höheren Energien verschoben worden sind, um die spektrale Lage des Signals an das Experiment anzupassen. Eine Korrektur dieser Größenordnung lässt sich durch die Unsicherheiten in den verwendeten BAC-Parametern und Abweichungen der Strukturparameter von den nominellen Angaben erklären. Beispielsweise fällt die Emissionswellenlänge mit dem experimentellen Wert zusammen, wenn man eine Stickstoffkonzentration von 3.7 % anstatt des nominellen Werts von 4 % verwendet. Linienform und Amplitude der Photolumineszenz bleiben bei solch kleinen Modifikationen der Strukturparameter weitgehend unverändert.

Für die Analyse entscheidend ist, den Signalverlauf der Spektren mit dem Modell wiederzugeben. Da die Linienform insbesondere durch die unordnungsinduzierte inhomogene Verbreiterung bestimmt wird, kann diese für die vorliegende Probe aus dem Theorie-Experiment-Vergleich mit hoher Genauigkeit extrahiert werden; gibt man in den Simulationen eine Halbwertsbreite von 35 meV vor, so passen sich die modellierten Spektren gerade den gemessenen Spektren an. Nur an der niederenergetischen Flanke, unterhalb von 1.25 eV, weichen die Spektren voneinander ab, weil man in diesem Bereich aufgrund von Lokalisierungseffekten, die im Modell unberücksichtigt sind, eine erhöhte Lumineszenz detektiert.

Außerdem erlaubt die mikroskopische Untersuchung Rückschlüsse auf die Ladungsträgerdichten, die im Quantenfilm bei den spezifischen Pumpintensitäten erzeugt werden, denn mit zunehmender Anregungsintensität wachsen die Amplitude und homogene Linienbreite der Lumineszenz sowie die anregungsinduzierte Rotverschiebung des Signals. Da die experimentell angewendete Pumpintensität in einem großen Bereich (bis zu zwei Größenordnungen) variiert wird, können die theoretischen und experimentellen Spektren auf diese Weise einander eindeutig zugeordnet werden. Die abgeleiteten Ladungsträgerdichten betragen 20 bis 25 % der Transparenzladungsträgerdichte und liegen damit deutlich unterhalb der Laserschwelle.

³Die experimentelle Untersuchung ist von B. Kunert, S. Liebich, K. Volz und W. Stolz (NAsP_{III/V} GmbH und Philipps-Universität Marburg) durchgeführt worden.

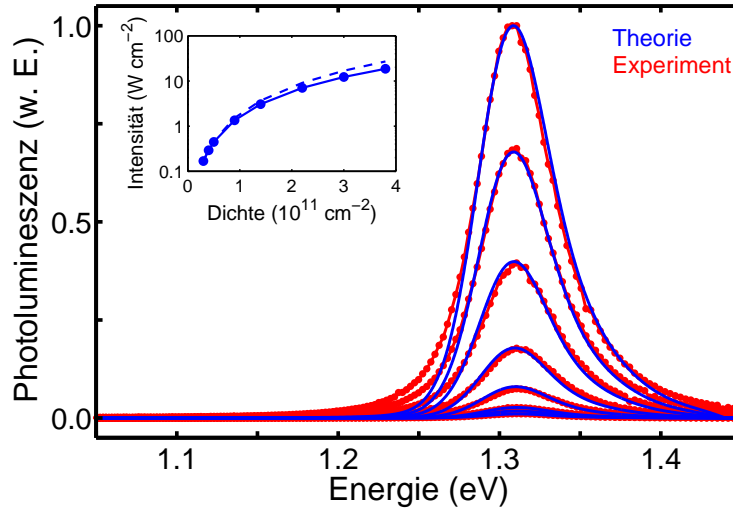


Abbildung 5.9.: Vergleich modellierter (blaue Linien) und gemessener (rote Linien) Photolumineszenzspektren eines 7 nm breiten $\text{Ga}(\text{N}_{0.04}\text{As}_{0.86}\text{P}_{0.10})$ -Quantenfilms mit GaP-Barrieren bei einer Temperatur von 294 K für verschiedene Anregungsintensitäten. Die berechneten Spektren sind mit 35 meV inhomogen verbreitert und um 29 meV zu höheren Energien verschoben worden, was auf Unsicherheiten der verwendeten BAC-Parameter $\alpha = -3.5$ eV, $\beta = 2.3$ eV und $\gamma = 0$ eV oder auf kleine Abweichungen der tatsächlichen Strukturparameter vom nominellen Design zurückzuführen ist. Die angenommenen Ladungsträgerdichten im Quantenfilm betragen $0.3, 0.4, 0.5, 0.9, 1.4, 2.2, 3.0$ und $3.8 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ (von unten nach oben). Die experimentellen Spektren sind bei Pumpintensitäten von 2, 5, 10, 25, 50, 100, 200 und 300 mW (von unten nach oben) von B. Kunert, S. Liebich, K. Volz und W. Stolz (NAsP_{III/V} GmbH und Philipps-Universität Marburg) aufgenommen worden (Probe 22955). Die Einfügung zeigt die Intensität der spontanen Emission als Funktion der Ladungsträgerdichte (N), die sich aus der mikroskopischen Analyse ergibt. Die Ergebnisse sind als Punkte eingetragen und können unter den gegebenen Bedingungen näherungsweise durch eine quadratische Funktion ($B N^2$) mit einem Koeffizienten von $B = 9 \cdot 10^{-4} \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}$ wiedergegeben werden (gestrichelte Linie).

In einer solchen Anregungssituation wirken sich Phasenraumfülleffekte kaum auf die Ladungsträgerverteilung aus, die Besetzung eines Elektron- bzw. Lochzustandes an der Bandkante nimmt daher etwa linear mit der Ladungsträgerdichte zu, und somit steigt die strahlende Rekombinationsrate quadratisch mit der Ladungsträgerdichte. Die Einfügung in Abb. 5.9 zeigt die abgestrahlte Lichtintensität, die aus dem Integral des jeweiligen, mikroskopisch berechneten Photolumineszenzspektrums ermittelt wird (Kapitel 2.4.1), als Funktion der Ladungsträgerdichte. Näherungsweise kann die Abhängigkeit durch

$$P_{\text{SE}} = \hbar\omega_{\text{SE}} B N^2 \quad (5.4)$$

beschrieben werden, wobei P_{SE} die Intensität der strahlenden Rekombinationsprozesse, N die Ladungsträgerdichte und $\hbar\omega_{\text{SE}}$ die Energie des emittierten Lichts (≈ 1.3 eV) bezeichnen. Der Koeffizient B wird aus der Anpassung an die mikroskopischen Ergebnisse im Bereich niedriger Ladungsträgerdichten bestimmt und beträgt für den Quantenfilm unter den gegebenen Bedingungen $9 \cdot 10^{-4} \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}$. Mit zunehmender Ladungsträgerdichte überschätzt die Näherung den Beitrag der spontanen Emission, aber für den diskutierten Bereich eignet sich die klassische

Parametrisierung durch die quadratische Funktion zur Beschreibung der Ladungsträgerdichteabhängigkeit.

5.4.2. Analyse der Rekombinationsprozesse

Ausgehend von der mikroskopischen Analyse der Photolumineszenzspektren (Abb. 5.9) wird die Abhängigkeit der spontanen Emission von der Pumpintensität ausgewertet. Da sich die theoretischen und experimentellen Spektren einander eindeutig zuordnen lassen, kann die Photolumineszenzintensität nicht nur als Funktion der Ladungsträgerdichte (Einfügung in Abb. 5.9) sondern auch als Funktion der aufgewendeten Pumpintensität aufgetragen werden (Abb. 5.10). In der doppelt-logarithmischen Darstellung sind die Werte, die sich aus den acht Spektren für die verschiedenen Anregungsstufen ergeben, als Punkte eingetragen. Die Größe der gepumpten, kreisförmigen Fläche wird mit einem Durchmesser von 0.01 cm angegeben⁴.

Theoretisch lässt sich der Zusammenhang zwischen Photolumineszenzintensität und Pumpintensität über eine Ratengleichung beschreiben. Im Gleichgewicht gilt:

$$\frac{P_{\text{Pump}}}{\hbar\omega_{\text{Pump}}} \eta = AN + BN^2 + CN^3. \quad (5.5)$$

Die rechte Seite der Gleichung stellt die klassische Parametrisierung der Ladungsträgerverlustrate dar, in der Defektrekombinationsprozesse linear, strahlende Rekombinationsprozesse quadratisch und Auger-Rekombinationsprozesse kubisch von der Ladungsträgerdichte N abhängen. Kompensiert werden die Verlustprozesse durch den Pumpmechanismus, der das System mit Ladungsträgern versorgt und durch die linke Seite der Gleichung repräsentiert wird. Die Ladungsträgererzeugungsrate lässt sich aus der experimentell aufgewendeten Pumpleistung P_{pump} mit einer Pumpenergie $\hbar\omega_{\text{pump}}$ von 1.6 eV abschätzen, wobei eine Absorptionseffizienz η von 0.5 % eingesetzt wird.

Gibt man bestimmte Koeffizienten A , B und C sowie eine Pumpleistung vor, lässt sich durch Lösen der Gl. 5.5 die Ladungsträgerdichte im Quantenfilm bestimmen, die sich im Gleichgewicht einstellt. Ausgehend von dieser Ladungsträgerdichte kann man nach Gl. 5.4 die unter den gegebenen Bedingungen zu erwartende Photolumineszenzintensität ermitteln. Betrachtet man beispielsweise ein System, in dem strahlende und Auger-Rekombinationsprozesse gegenüber Defektrekombinationsprozessen eine untergeordnete Rolle spielen, d. h. $B \approx 0$ und $C \approx 0$, dann stellen sich Ladungsträgerdichten proportional zur Pumpintensität ein. Dies führt schließlich zu einer quadratischen Abhängigkeit der Photolumineszenzintensität von der Pumpintensität. Dominieren hingegen strahlende Rekombinationsprozesse gegenüber Defekt- und Auger-Rekombinationsprozessen, hängt die Ladungsträgerdichte umgekehrt quadratisch von der Pumpintensität ab, so dass sich ein linearer Zusammenhang zwischen Photolumineszenzintensität und Pumpintensität zeigt.

⁴Der Wert ist von B. Kunert, S. Liebich, K. Volz und W. Stolz (NAsP_{III/V} GmbH und Philipps-Universität Marburg) abgeschätzt worden.

Die klassische Parametrisierung der Verlustprozesse mit spezifischen A -, B -, und C -Koeffizienten, die in Gl. 5.5 angesetzt wird, gilt zwar nur in einem eingeschränkten Bereich, aber für die Pumpintensitäten weit unterhalb der Laserschwelle, die im Zentrum der Untersuchung stehen, stellt sie eine geeignete Beschreibung dar. Um den Beitrag durch die spontane Emission quantitativ zu erfassen, wird im Folgenden ein B -Koeffizienten von $9 \cdot 10^{-4} \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}$ eingesetzt, der sich aus der mikroskopischen Berechnung der Lumineszenz für das System ableiten lässt (Kapitel 5.4.1). Auger-Rekombinationsprozesse können bei so niedrigen Anregungsdichten i. A. vernachlässigt werden, und somit hat der gewählte C -Koeffizient von $9 \cdot 10^{-18} \text{ cm}^4 \text{ s}^{-1}$ keine Auswirkungen auf die Ergebnisse.

Um die Bedeutsamkeit von Rekombinationsprozessen an Defekten in dem System einzuordnen, werden drei unterschiedliche Situationen vorgegeben, für die jeweils die Ratengleichung gelöst und die Photolumineszenzintensität berechnet wird. Abb. 5.10 zeigt die Ergebnisse als Funktion der Pumpintensität. Im Fall des kleinsten A -Koeffizienten von 10^5 s^{-1} (Abb. 5.10, blaue Linie) dominieren im gesamten Anregungsbereich strahlende Rekombinationsprozesse, denn die Steigung der Kurve in der doppelt-logarithmischen Darstellung ist konstant 1, woraus sich ein linearer Zusammenhang zwischen Photolumineszenzintensität und Pumpintensität folgern lässt. Vergrößert man den A -Koeffizienten um zwei Größenordnungen auf einen Wert von 10^7 s^{-1} (Abb. 5.10, rote Linie), dominieren bei hohen Pumpintensitäten ebenfalls die strahlenden Prozesse. Allerdings geht die Steigung bei einer Pumpintensität von etwa 10 W cm^{-2} von einem Wert von 1 in eine Steigung von 2 über, was darauf schließen lässt, dass die Photolumineszenzintensität quadratisch mit der Pumpintensität steigt. Dies deutet auf die Dominanz der Defektrekombinationsprozesse unterhalb einer Pumpintensität von etwa 10 W cm^{-2} hin. Im Fall eines noch größeren A -Koeffizienten von 10^9 s^{-1} (Abb. 5.10, grüne Linie) stellt die Defekt-Rekombination schließlich im gesamten untersuchten Anregungsbereich den größten Beitrag an den Ladungsträgerverlusten.

Die Steigung der Punkte, die aus der mikroskopischen Analyse der Photolumineszenzspektren extrahiert werden, lassen offensichtlich eine Dominanz strahlender Rekombinationsprozesse unter den gegebenen Anregungsbedingungen vermuten. Um die Ergebnisse zu bekräftigen, sind weitere Untersuchungen geplant, insbesondere sollen Photolumineszenzspektren bei reduzierter Pumpintensität aufgenommen werden. Damit kann man den Übergang von der Steigung von 1 in die Steigung von 2, die eine Dominanz der Ladungsträgerverluste durch strahlende bzw. Defekt-assistierte Rekombination signalisiert, verifizieren und zur Bestimmung des A -Koeffizienten für das System nutzen.

Anzumerken ist, dass in der Analyse eine streng lineare Abhängigkeit der Defekt-Rekombination von der Ladungsträgerdichte angenommen wird. Grundsätzlich sind auch Defekt-Rekombinationsprozesse denkbar, die durch andere Abhängigkeiten von der Ladungsträgerdichte charakterisiert sind [146]. Ein quadratisch von der Dichte abhängiger Beitrag lässt sich durch die Untersuchung nicht von dem der strahlenden Rekombination unterscheiden.

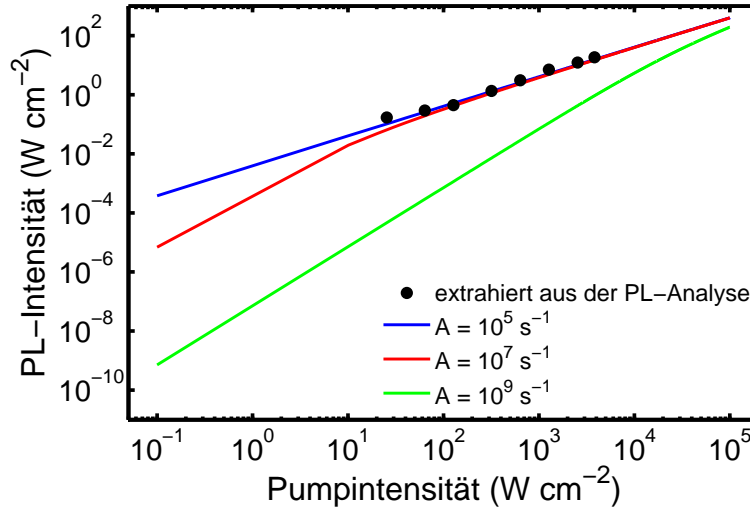


Abbildung 5.10.: Photolumineszenzintensität als Funktion der Pumpintensität, die sich nach der Ratengleichung ergibt. Für den Koeffizienten A , der die Ladungsträgerverluste durch Rekombinationen an Defekten beschreibt, werden Werte von 10^5 s^{-1} (blaue Linie), 10^7 s^{-1} (rote Linie) und 10^9 s^{-1} (grüne Linie) vorgegeben. Die Auger-Rekombination kann in dem Anregungsbereich vernachlässigt werden und wird durch einen typischen C -Koeffizienten von $9 \cdot 10^{-18} \text{ cm}^4 \text{ s}^{-1}$ erfasst; der genaue Wert spielt in der Auswertung keine Rolle. Der Koeffizient B ist aus den mikroskopischen Berechnung der Lumineszenz für den vorliegenden 7 nm breiten Ga(N_{0.04}As_{0.86}P_{0.10})/GaP-Quantenfilm bei einer Temperatur von 294 K im Bereich niedriger Ladungsträgerdichten extrahiert worden. In den Simulationen ist eine Absorptionseffizienz von 0.5 % und eine Pumpenergie von 1.6 eV angenommen. Die Ergebnisse, die aus dem Vergleich der berechneten und gemessenen Photolumineszenzspektren (Abb. 5.9) gewonnen werden, sind als Punkte eingetragen.

5.5. Optische Verstärkung

Um das Potential von verdünnt stickstoffhaltigen Ga(NAsP)-Strukturen für Lasersysteme auf Silizium-Substrat einzuschätzen, werden die optischen Verstärkungseigenschaften berechnet und bewertet. Die Ergebnisse werden mit experimentellen Daten verglichen; insbesondere erlaubt das mikroskopische Modell, den Einfluss kritischer Strukturparameter auf das Verstärkungsverhalten zu analysieren, wie z. B. die Zusammensetzung des Barrierenmaterials.

5.5.1. Einordnung der Verstärkungseigenschaften

Untersucht wird der optische Materialgewinn eines typischen Ga(NAsP)-Quantenfilms, der für eine Laserstruktur auf einem Silizium-Substrat vorgesehen ist. Der Quantenfilm des Entwurfs soll aus Ga(N_{0.07}As_{0.82}P_{0.11}) bestehen, eine Breite von 4.7 nm aufweisen und von jeweils 3 nm dünnen Schichten aus GaP umgeben sein. Da sich die kleine Differenz der Gitterkonstanten von GaP und Si beim Wachstum von breiten Barrierenschichten nachteilig auf die Probenqualität auswirkt, bettet man den Quantenfilm in äußere Barrierenschichten aus (BGa)P ein, mit denen bei geeigneter Borbeimischung eine Gitteranpassung bezüglich des Silizium-Substrats sichergestellt

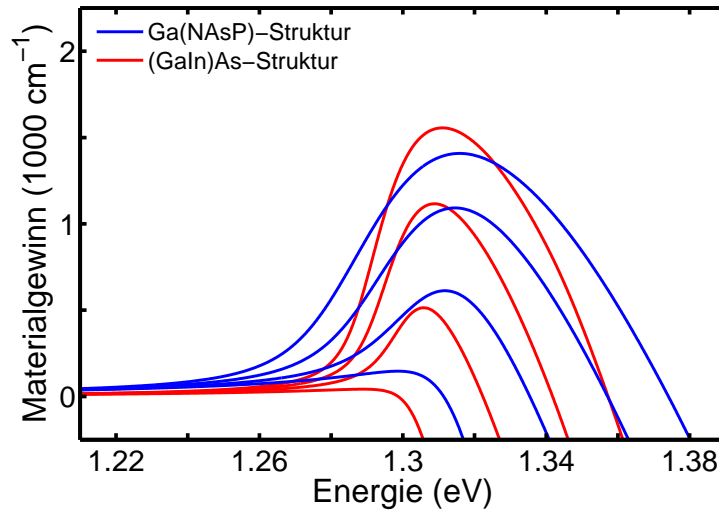


Abbildung 5.11.: Materialgewinnspektren für einen 4.7 nm breiten $\text{Ga}(\text{N}_{0.07}\text{As}_{0.82}\text{P}_{0.11})/\text{GaP}$ -Quantenfilm (blaue Linien) und einen 4.7 nm breiten $(\text{Ga}_{0.87}\text{In}_{0.13})\text{As}/\text{GaAs}$ -Quantenfilm (rote Linien) bei einer Temperatur von 300 K. In den Simulationen sind jeweils Ladungsträgerdichten von $2, 3, 4$ und $5 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ (von unten nach oben) angenommen. Es werden BAC-Parameter von $\alpha = 0 \text{ eV}$, $\beta = 1.9 \text{ eV}$ und $\gamma = 0 \text{ eV}$ eingesetzt.

werden kann [147]. In den Simulationen wird zunächst angenommen, dass sich die Bandlücke durch den Einbau der kleinen Menge Bor nicht ändert und durch den Wert von GaP wiedergegeben werden kann.

Davon ausgehend werden Materialgewinnspektren bei einer Temperatur von 300 K und für verschiedene Ladungsträgerdichten bestimmt (Abb. 5.11, blaue Linien). Sie ergeben sich aus den Halbleiter-Bloch-Gleichungen, wobei für die Beschreibung der eingehenden Bandstruktur BAC-Parameter von $\alpha = 0 \text{ eV}$, $\beta = 1.9 \text{ eV}$ und $\gamma = 0 \text{ eV}$ verwendet werden. Diese Wahl berücksichtigt im Vergleich zu dem BAC-Parametersatz, der in den Kapiteln 5.2 bis 5.4 eingesetzt wird, eine schwächere BAC-Kopplung, die für eine realistische Beschreibung von Strukturen mit der relativ hohen Stickstoffkonzentration von 7 % notwendig erscheint.

Die Simulationen zeigen Gewinnamplituden ähnlich zu denen, die mit konventionellen GaAs-basierten Strukturen erzielt werden. Zur Illustration wird der Materialgewinn einer Struktur, die aus einem 4.7 nm breiten $(\text{Ga}_{0.87}\text{In}_{0.13})\text{As}$ -Quantenfilm mit GaAs-Barrieren besteht, analog berechnet. Für den Vergleich wählt man die Indiumkonzentration des $(\text{GaIn})\text{As}$ -Systems so, dass seine Emissionswellenlänge mit der des $\text{Ga}(\text{NAsP})$ -Systems zusammenfällt. Dies legt einen Anteil von 13 % Indium fest, womit der Quantenfilm relativ flache Potentialtöpfe für die Elektronen und Löcher bildet, was die relativ hohe Transparenzladungsträgerdichte von über $2 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ für das System erklärt.

Die Ergebnisse für das $(\text{GaIn})\text{As}$ -System sind in Abb. 5.11 als rote Linien den Spektren des $\text{Ga}(\text{NAsP})$ -Systems gegenübergestellt. Zwar zeigt der Materialgewinn des $\text{Ga}(\text{NAsP})$ -Systems eine stärkere Verbreiterung als das $(\text{GaIn})\text{As}$ -System, aber unter den vorgegebenen Anregungs-

bedingungen lassen sich ähnliche Amplituden erzielen, was das Potential des Ga(NAsP)-Systems für Laseranwendungen hervorhebt.

5.5.2. Vergleich theoretischer und experimenteller Verstärkungsspektren

Im nächsten Schritt werden modellierte Verstärkungsspektren mit experimentellen Ergebnissen verglichen. Vorgestellt werden die Analysen für zwei ausgewählte Probenstrukturen⁵.

Nominell enthalten beide Strukturen drei je 4.7 nm breite Ga(N_{0.07}As_{0.82}P_{0.11})-Quantenfilme, die von 3 nm breiten GaP-Schichten umgeben und zwischen Barrierenschichten mit einer Dicke von jeweils 20 nm eingebettet sind. Das Barrierenmaterial ist bezüglich Silizium gitterangepasst gewählt, aber während die Barrieren in der einen Struktur durch (BGa)P (Probe 15472) gebildet werden, wird in der anderen Struktur (BGa)(AsP) (Probe 15506) verwendet. Die Strukturen sind auf Silizium-Substraten aufgewachsen, wobei zwischen dem Substrat und dem aktiven Bereich eine GaP-Pufferschicht und eine 500 nm breite (BGa)P-Schicht eingebracht sind. Auf der anderen Seite wird die Probe durch eine 50 nm (BGa)P-Schicht abgedeckt. Das resultierende Brechungsindexprofil legt den Einschlussfaktor fest, der den Überlapp der optischen Mode mit den Quantenfilmschichten beschreibt. Für die vorliegende Struktur kann ein Einschlussfaktor im Bereich von 1 % abgeleitet werden.⁶

Mit dem Einschlussfaktor lässt sich aus dem optischen Materialgewinn eines einzelnen Quantenfilms der Modalgewinn, d. h. die optische Verstärkung, die sich durch das System insgesamt ergibt, ermitteln. Um Modalgewinnspektren für die Probenstruktur 15472 zu bestimmen, werden der Berechnung Materialgewinnspektren zugrundegelegt, die nach Kapitel 5.5.1 für einen einzelnen Quantenfilm zu erwarten sind. Abb. 5.12 (oben) zeigt die resultierenden Modalgewinnspektren für verschiedene Ladungsträgerdichten. Sie enthalten auch eine unordnungsinduzierte inhomogene Verbreiterung mit einer Halbwertsbreite von 35 meV.

Auf diese Weise können die mikroskopischen Simulationen mit Messungen⁷ verglichen werden. Im Experiment ist die verstärkte spontane Emission als Funktion der Strichlänge der optisch angeregten Probenfläche aufgenommen worden, woraus sich schließlich der Modalgewinn ableiten lässt [148, 149]. Die Ergebnisse sind in Abb. 5.12 (oben) für verschiedene Anregungsintensitäten eingezeichnet (rote bis gelbe Linien). Es ist anzumerken, dass die Auswertung nach der Strichlängenmethode nur in einem begrenzten Bereich der Anregung bzw. Verstärkung gültig ist, und somit eine quantitative Bestimmung der optischen Verstärkung nur eingeschränkt möglich ist. Insbesondere die Flanken der Verstärkungskurve sind durch große Messunsicherheiten gekennzeichnet, die sich in einer starken Streuung der Datenpunkte zeigen; zur besseren Übersicht sind

⁵Die Proben sind von B. Kunert, S. Liebich, K. Volz und W. Stolz (NAsP_{III/V} GmbH und Philipps-Universität Marburg) mittels metallorganischer Gasphasenepitaxie hergestellt worden.

⁶Der Wert ist von S. Rogowsky, R. Ostendorf und J. Wagner (Fraunhofer-Institut für Angewandte Festkörperphysik, Freiburg) abgeschätzt worden.

⁷Die Modalgewinnspektren sind experimentell von N. Koukourakis, N. C. Gerhardt und M. R. Hofmann (Ruhr-Universität Bochum) aufgenommen worden.

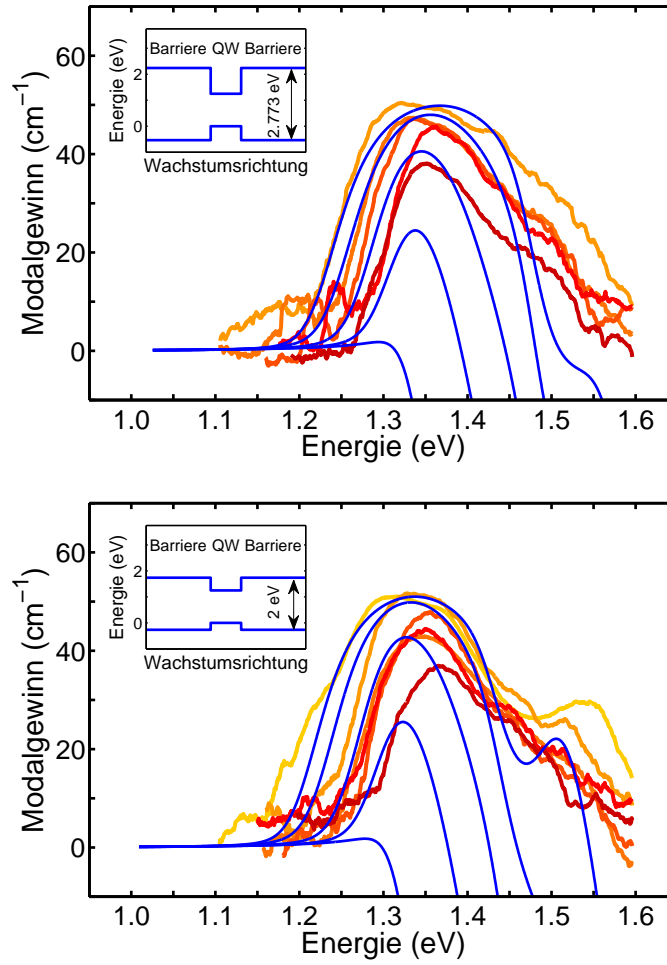


Abbildung 5.12.: Vergleich modellierter (blaue Linien) und gemessener (rote bis gelbe Linien) Modalgewinnspektren von Probe 15472 (*oben*) und Probe 15506 (*unten*) bei einer Temperatur von 300 K für verschiedene Anregungsstufen. Nominell enthalten beide Proben identische $\text{Ga}(\text{N}_{0.07}\text{As}_{0.82}\text{P}_{0.11})$ -Quantenfilme (QW), die von dünnen GaP-Schichten umgeben sind. Die Proben unterscheiden sich aber in der chemischen Zusammensetzung der äußeren Barrieren, die durch (BGa)P (*oben*) bzw. (BGa)(AsP) (*unten*) gebildet werden. In der Simulation sind eine inhomogene Verbreiterung von 35 meV und ein Einschlussfaktor der Lichtmode von 1 % berücksichtigt. Die Spektren sind 20 meV zu höheren Energien verschoben, was auf Unsicherheiten der verwendeten Parameter zurückzuführen ist. Die angenommenen Ladungsträgerdichten pro Quantenfilm betragen 2, 5, 10, 20 und $30 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ (von unten nach oben). Die experimentellen Spektren sind nach der Strichlängenmethode bei Anregungsintensitäten von 42, 58, 83, 117 und $167 \mu\text{J cm}^{-2}$ (*oben*) bzw. 42, 58, 83, 117, 167 und $1670 \mu\text{J cm}^{-2}$ (*unten*) ermittelt. Das Experiment ist von N. Koukourakis, N. C. Gerhardt und M. R. Hofmann (Ruhr-Universität Bochum) an von B. Kunert, S. Liebich, K. Volz und W. Stolz (NAsP_{III/V} GmbH und Philipps-Universität Marburg) hergestellten Proben durchgeführt worden. Um die Nulllinie im niederenergetischen Bereich zu treffen, sind die Messungen vertikal um 30 cm^{-1} verschoben; der Versatz kommt durch die optischen Verluste des Systems zustande. Die Einfügungen zeigen den Bandkantenverlauf eines einzelnen Quantenfilms, der den Simulationen zugrunde liegt; die Bandlücke des Quantenfilmmaterials soll in beiden Strukturen gleich sein, hingegen wird die Bandlücke der Barrierschichten variiert.

die Daten in der Darstellung geglättet. Da im Experiment optische Verluste des Systems für einen Versatz des Modalgewinns sorgen, werden die Spektren zudem vertikal um 30 cm^{-1} verschoben, so dass sich die Spektren im niederenergetischen Bereich der Nulllinie anpassen.

Die theoretisch und experimentell gewonnen Verstärkungsspektren für die Probenstruktur 15472 stimmen in ihrer spektralen Lage für die gewählten Bandstrukturparameter innerhalb der Wachstumsunsicherheiten überein. Um die gemessenen Maximalwerte des Modalgewinns mit dem mikroskopischen Modell wiederzugeben, müssen in den Simulationen Ladungsträgerdichten bis zu $30 \cdot 10^{12}\text{ cm}^{-2}$ vorgegeben werden, die in den Sättigungsbereich des Laserübergangs fallen. Auch im Experiment beobachtet man für die aufgebrachten Anregungsintensitäten eine Art Sättigung, denn das Maximum des Modalgewinns steigt nur sehr wenig mit der Pumpstärke. Insgesamt weist die experimentell ermittelte Verstärkung jedoch eine größere spektrale Breite auf, insbesondere die hochenergetische Flanke verläuft im Vergleich zu den Simulationen flacher. Aufgrund der großen Messunsicherheiten in diesem Bereich steht im Zentrum der Untersuchung die Frage, ob sich generelle Trends mit dem mikroskopischen Modell wiedergeben lassen.

Abb. 5.12 (unten) zeigt eine entsprechende Analyse für die Probenstruktur 15506, in der die Barrieren durch das quaternäre (BGa)(AsP) gebildet werden. Experimentell beobachtet man für niedrige Anregungsintensitäten ein ähnliches Verstärkungsverhalten wie für die Probenstruktur 15472, aber mit zunehmender Anregung bildet sich im Fall der quaternären Barrieren neben dem Maximum bei einer Energie um 1.34 eV ein zweites Maximum bei einer Energie um 1.52 eV aus. Die Pumpintensität kann also nicht vollständig in eine Verstärkung am Laserübergang umgesetzt werden, sondern leistet einer Besetzungsinversion höhere Subbänder des Quantenfilms Vorschub. Es stellt sich die Frage, inwieweit das Auftreten des zweiten Maximums auf die spezifische Barrierenzusammensetzung zurückgeführt werden kann und Rückschlüsse auf den Bandkantenverlauf zulässt.

Um diesen Aspekt zu analysieren, werden Simulationen für verschiedene Barrierenkonstellation durchgeführt. Zwar ist der Quantenfilm in beiden Proben von GaP-Schichten umgeben, aber aufgrund ihrer geringen Breite werden die optischen Eigenschaften des Quantenfilms speziell durch die äußeren Barrieren, d. h. (BGa)P bzw. (BGa)(AsP), beeinflusst. Die Bandlücke von (BGa)P wird durch den Wert von GaP beschrieben, eine zusätzliche Arsenbeimischung in den quaternären Schichten der Probenstruktur 15506 wird die Bandlücke reduzieren.

Zu Testzwecken werden zunächst künstliche Barrieren mit einer effektiven Bandlücke von 2 eV vorgegeben (Einfügung in Abb. 5.12 (unten)). Mit der geringeren Tiefe des Potentialtopfs für Elektronen und Löcher, verschiebt sich die effektive Bandlücke, d. h. der energetische Abstand zwischen dem tiefsten Elektron- und dem tiefsten Lochsubband am Γ -Punkt, um 16 meV . Darüber hinaus verringert sich der energetische Abstand zwischen den einzelnen Elektron- und den einzelnen Lochsubbändern, so dass bei einer vorgegebenen Ladungsträgerdichte Zustände in höheren Subbändern dichter besetzt werden. Damit stellt sich in dem System mit den reduzierten Barrieren schon bei einer geringeren Ladungsträgerdichte eine Besetzungsinversion höherer Subbänder ein. Im vorliegenden System wird das zweite Maximum bei einer Energie um 1.52 eV durch Übergänge zwischen dem tiefsten Elektron- und dem drittiefsten (das erste mit vorwiegend lh-Charakter) Lochsubband verursacht, die eine große Oszillatorstärke aufweisen. Da

sich die Resonanz im Fall reduzierter Barrieren 35 meV zu niedrigeren Energien verschiebt, werden die beteiligten Zustände dementsprechend bei kleineren Anregungsdichten besetzt.

Die chemische Zusammensetzung des (BGa)(AsP)-Barrierenmaterials motiviert allerdings vielmehr eine Bandlücke von 2.58 eV, die sich unter Vernachlässigung der Borbeimischung nach einer Interpolation aus den Werten für die binären Komponenten GaAs und GaP ergibt [15]. Vergleicht man die Simulationen für die Struktur mit einer 2.58 eV großen Barrierenbandlücke und einer 2.73 eV großen Barrierenbandlücke, die die (BGa)As-Schichten der Probe 15472 beschreiben soll, stellt man jedoch keine wesentlichen Unterschiede ihres Verstärkungsverhaltens fest: Um in den Spektren ein zweites Maximum zu beobachten, müssen für beide Konfigurationen vergleichbar hohe Ladungsträgerdichten angenommen werden. Erst mit der drastischen Reduktion der Barrierenbandlücke auf 2 eV wächst die zweite Resonanz schon bei niedrigeren Ladungsträgerdichten heraus, wie sie bei der Probe 15506 experimentell beobachtet worden ist. Da der Bandkantenverlauf realer Quantenfilme vom idealen, kastenförmigen Potentialtopf merklich abweichen kann [150], ist eine Beschreibung mit den reduzierten, effektiven Barrieren grundsätzlich aber nicht unangemessen.

Möglicherweise sind die Unterschiede der Verstärkungsspektren, die die beiden Proben in der Messung zeigen, auch zum Teil dadurch bedingt, dass die experimentellen Anregungsbedingungen variieren. Welcher Anteil der Pumpleistung tatsächlich als Ladungsträgerdichte im Quantenfilm umgesetzt wird, ist aus experimenteller Sicht nur schwer abzuschätzen.

Fazit

Die Charakterisierung von verdünnt stickstoffhaltigen Ga(NAsP)-basierten Strukturen macht eine Modifikation der Beschreibung der elektronischen Bandstruktur erforderlich. In einem ersten Angang bietet sich dazu das numerisch wenig aufwändige BAC-Modell an. Dabei wird die 8×8 -k · p-Bandstrukturrechnung durch die Einbindung von dispersionslosen Stickstoff-Bändern zu einem 10×10 -Modell erweitert. Die resultierenden elektronischen Eigenzustände und Energieeigenwerte werden dann zur Berechnung elektromodulierter Reflektivitätsspektren, Photolumineszenzspektren und optischen Verstärkungsspektren eingesetzt.

Sowohl der Vergleich der Photolumineszenzspektren als auch der Vergleich der optischen Verstärkungsspektren mit Messungen zeigen, dass der theoretische Ansatz wesentliche Aspekte der experimentellen Spektren wiedergeben kann, und dass somit die Eigenschaften analysiert werden können. Bei der Untersuchung der Verstärkungseigenschaften wird auf diese Weise die Barrierenkonstellation in den betrachteten Probenstrukturen auf Siliziumbasis als Verursacher von Signaturen im Spektrum erkannt.

Als besonders geeignet für eine eingehende Charakterisierung der Strukturen erweist sich die Methode der elektromodulierten Reflexion, denn sie legt zahlreiche Interbandübergänge des Quantenfilmsystems offen. Experimentell gewonnene elektromodulierte Reflektivitätsspektren lassen sich mit der mikroskopischen Theorie analysieren und interpretieren. Ungeachtet der leichten Abweichungen in theoretischen und experimentellen Spektren, spiegelt das Modell die wesentlichen Charakteristika der Messergebnisse wider.

Die Materialgewinnamplituden sind ähnlich hoch wie die konventioneller GaAs-basierter Strukturen, so dass das Ga(NAsP)-basierte Material eine aussichtsreiche Perspektive bietet, Laser auf Siliziumbasis zu realisieren. Die Wahl der Bandstrukturparameter für das Materialsystem wird sich durch weitere Theorie-Experiment-Vergleiche verfeinern lassen. Auf einer solchen Grundlage ließe sich auch entscheiden, ob das BAC-Modell angemessen ist, bzw. ob Aspekte komplexerer Methoden zur Bandstrukturberechnung [151] aufgegriffen und in das Modell integriert werden sollten.

6. Ga(AsBi)-basiertes Materialsystem

In diesem Kapitel wird vorgestellt, wie die mikroskopische Theorie angewendet werden kann, um die optoelektronischen Eigenschaften von Ga(AsBi)-Strukturen zu prognostizieren und auf diese Weise Charakteristika des Materialsystems aufzuzeigen und zu analysieren. Damit kann schließlich das Potential des neuartigen Materialsystems für Laserapplikationen eingeschätzt werden.

Nach einer Einführung (Kapitel 6.1) wird die theoretische Beschreibung erweitert, um die Besonderheiten der elektronischen Bandstruktur von Ga(AsBi) zu berücksichtigen (Kapitel 6.2). Auf dieser Basis werden die optischen Eigenschaften eines Ga(AsBi)-Quantenfilms mit GaAs-Barrieren prognostiziert. Ein unbekannter Strukturparameter ist dabei die Versetzung der Bandkanten aufeinanderfolgender Materialschichten. In Kapitel 6.3 wird sein Einfluss auf die Verstärkungseigenschaften untersucht und Möglichkeiten zur Charakterisierung werden aufgezeigt. Schließlich werden in Kapitel 6.4 die Lasergewinn- und Laserverlustprozesse von zwei verschiedenen Ga(AsBi)-Quantenfilmsystemen analysiert, die in Halbleiterlasern Verwendung finden können.

6.1. Einführung in das Materialsystem

Wird ein kleiner Anteil Bismut in GaAs zugesetzt, beobachtet man eine drastische Reduktion der Bandlücke von 60 bis 80 meV pro Prozent Bismut [152, 153, 154]. So lassen sich mit dem Ga(AsBi)-System Emissionswellenlängen aus einem weiten Bereich im nahen bis mittleren Infraroten erzielen. Beispielsweise kann das Material als Verstärkungsmedium in Diodenlasern für Wellenlängen von 1.3 und 1.55 μm Anwendung finden, die zur optischen Datenübertragung in der Telekommunikation gefragt sind. Trotz des metallischen Charakters von GaBi und der großen Gitterfehlanpassung [155, 156], haben sich bereits Ga(AsBi)-Volumenkristalle mit bis zu 10 % Bismut herstellen lassen [157].

Bismut bildet in der GaAs-Halbleitermatrix isoelektrische Störstellen, denn die Elektronegativität von Bismutatomen ist deutlich kleiner als die der ersetzten Arsenatome [117]. Das elektronische Niveau der Störstellen ist mit den Valenzbändern der Halbleitermatrix resonant, so dass die Bismutbeimischung zu einer Modifikation der elektronischen Bandstruktur im Bereich der Valenzbänder führt [158]. Damit unterscheidet sie sich von einer Beimischung durch Stickstoff, der zwar wie Bismut isoelektrische Störstellen induziert, aufgrund der vergleichsweise hohen Elektronegativität aber den Bereich der Leitungsbandkante verändert (Kapitel 5.1.2).

Überträgt man die Beschreibung der elektronischen Bandstruktur von III-N-V-Halbleitermaterialien auf die bismuthaltige Verbindung, kann die Kopplung der Valenzbänder mit den Zuständen der stark lokalisierten Bismutatome mit einem Valenzband-Abstoßungsmodell (engl.: *valence-band-anticrossing*, VBAC) erfasst werden [159, 160]. Demnach spalten die schwerlochartigen, leichtlochartigen und spin-bahn-abgespaltenen Bänder des Systems in jeweils zwei Bänder auf, die gegenüber den ungestörten Bändern bei einer niedrigeren und einer höheren Energie liegen.

6.2. Einfluss von Bismut auf die Bandstruktur

Um die VBAC-Kopplung in die Beschreibung der elektronischen Energieeigenwerte und Eigenzustände von Ga(AsBi)-Quantenfilmen einzubinden, wird die Berechnung der Bandstruktur in Analogie zur Modellierung der Ga(NAsP)-Systeme (Kapitel 5.2) erweitert.

6.2.1. Erweiterung der $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Matrix

Ausgehend von der 8×8 - $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Matrix (Kapitel 2.1) wird der Einfluss der Bismutbeimischung einbezogen, indem die $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Matrix durch sechs spinentartete bismutartige Komponenten ergänzt wird, die als dispersionsfreie Bänder mit den Valenzbändern des GaAs-Halbleiterwirstkristalls wechselwirken. Damit ergibt sich eine 14×14 -Matrix [160]:

$$\mathcal{H}_{\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}} = \begin{pmatrix} H_{\text{so}} & V_{\text{hh-so}} & V_{\text{lh-so}} & V_{\text{cb-so}} & V_{\text{Bi}} & 0 & 0 \\ V_{\text{so-hh}} & H_{\text{hh}} & V_{\text{lh-hh}} & V_{\text{cb-hh}} & 0 & V_{\text{Bi}} & 0 \\ V_{\text{so-lh}} & V_{\text{hh-lh}} & H_{\text{lh}} & V_{\text{cb-lh}} & 0 & 0 & V_{\text{Bi}} \\ V_{\text{so-cb}} & V_{\text{hh-cb}} & V_{\text{lh-cb}} & H_{\text{cb}} & 0 & 0 & 0 \\ V_{\text{Bi}} & 0 & 0 & 0 & H_{\text{Bi,so}} & 0 & 0 \\ 0 & V_{\text{Bi}} & 0 & 0 & 0 & H_{\text{Bi,hh}} & 0 \\ 0 & 0 & V_{\text{Bi}} & 0 & 0 & 0 & H_{\text{Bi,so}} \end{pmatrix} \begin{matrix} \leftarrow \text{so} \\ \leftarrow \text{hh} \\ \leftarrow \text{lh} \\ \leftarrow \text{cb} \\ \leftarrow \text{Bi, so} \\ \leftarrow \text{Bi, hh} \\ \leftarrow \text{Bi, lh} \end{matrix} \quad (6.1)$$

In der Schreibweise sind die einzelnen Komponenten jeweils zweifach spinentartet.

Der obere linke Block der Matrix mit 4×4 je zweifach entarteten Elementen enthält die Information über die Bandstruktur des GaAs-Halbleiterwirstmaterials. Die energetische Lage der Spin-Bahn-abgespaltenen, schwerlochartigen und leichtlochartigen Valenzbänder, die jeweils in die diagonalen Elemente H_{so} , H_{hh} und H_{lh} einfließen, rechnet zusätzlich aber eine Verschiebung der Bänder mit wachsender Bismutkonzentration ein:

$$E_{\text{so}} = E_{\text{so},0} - \Delta E_{\text{so}} x, \quad (6.2)$$

$$E_{hh} = E_{hh,0} + \Delta E_{hh}x, \quad (6.3)$$

$$E_{lh} = E_{lh,0} + \Delta E_{lh}x. \quad (6.4)$$

Dabei bezeichnen $E_{so,0}$, $E_{hh,0}$ und $E_{lh,0}$ die Energiewerte für die ungestörten Valenzbänder der GaAs-Halbleitermatrix, unter Berücksichtigung der Verspannung. Die Parameter ΔE_{so} , ΔE_{hh} und ΔE_{lh} geben die Verschiebungsraten an, die eine lineare Änderung der energetischen Lage mit der Bismutkonzentration x festlegen. Für ΔE_{hh} und ΔE_{lh} werden gleiche Werte angenommen [160].

Die Diagonalelemente $H_{Bi,so}$, $H_{Bi,hh}$ und $H_{Bi,lh}$ sind dispersionsfrei und enthalten jeweils die Energiewerte für die elektronischen Niveaus der Bismutstörstelle $E_{Bi,so}$, $E_{Bi,hh}$ und $E_{Bi,lh}$. Die Parameter $E_{Bi,hh}$ und $E_{Bi,lh}$ werden identisch gewählt, hingegen liegt $E_{Bi,so}$ weiter von der Bandkante entfernt.

Die Kopplung der Störstellenbänder an die Spin-Bahn-abgespaltenen, schwerlochartigen und leichtlochartigen Valenzbänder wird durch die nicht-diagonalen Einträge V_{Bi} beschrieben. Ihre Wechselwirkungsstärke

$$V_{Bi} = C_{Bi}\sqrt{x} \quad (6.5)$$

wird über den Kopplungsparameter C_{Bi} eingestellt, der für alle Bänder gleich groß sein soll, und hängt außerdem von der Bismutkonzentration x ab.

Mit der erweiterten $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Matrix (Gl. 6.1) kann schließlich die elektronische Bandstruktur von Ga(AsBi)-Systemen störungstheoretisch ermittelt werden. Die Beiträge der einzelnen Basisfunktionen und die resultierende Energiedispersion hängen speziell von der Wahl der VBAC-Parameter C_{Bi} , $E_{Bi,so}$, $E_{Bi,hh/lh}$, ΔE_{so} und $\Delta E_{hh/lh}$ ab, die aus empirischen Studien abgeleitet werden müssen.

6.2.2. Emissionswellenlänge und VBAC-Parameter

Die Energieeigenwerte sowie die Dipol- und Coulomb-Matrixelemente, die sich aus den Eigenzuständen ergeben, werden eingesetzt, um die optischen Eigenschaften von Ga(AsBi)-Quantenfilmsystemen zu untersuchen. In den mikroskopischen Berechnungen werden die bismutartigen Anteile der einzelnen Zustände analog zu den stickstoffartigen Anteilen der Zustände im Ga(NAsP)-System, wie in Kapitel 5.2.3 beschrieben, behandelt. Exemplarisch wird eine Serie von Ga(AsBi)-Quantenfilmen von 12 nm Breite analysiert, die in GaAs eingebettet sind. Da die Gitterkonstante von GaAs kleiner als die von Ga(AsBi) ist, werden die Quantenfilme kompressiv verspannt. Die Bismutkonzentration im Quantenfilm wird von 2 bis 10 % variiert.

Abb. 6.1 zeigt die Lumineszenzspektren, die für die verschiedenen Strukturen mit den Halbleiter-Lumineszenz-Gleichungen (Kapitel 2.3.1) ermittelt werden. Mit steigender Bismutkonzentration im Quantenfilm verschiebt sich das Lumineszenzsignal zu niedrigeren Energien, was die Reduktion der Bandlücke nach dem VBAC-Modell widerspiegelt. Während das Maximum durch Übergänge zwischen dem tiefsten Elektron- und dem tiefsten Lochsubband verursacht wird, bilden Übergänge zwischen dem tiefsten Elektron- und dem ersten Lochsubband mit vorwiegendem

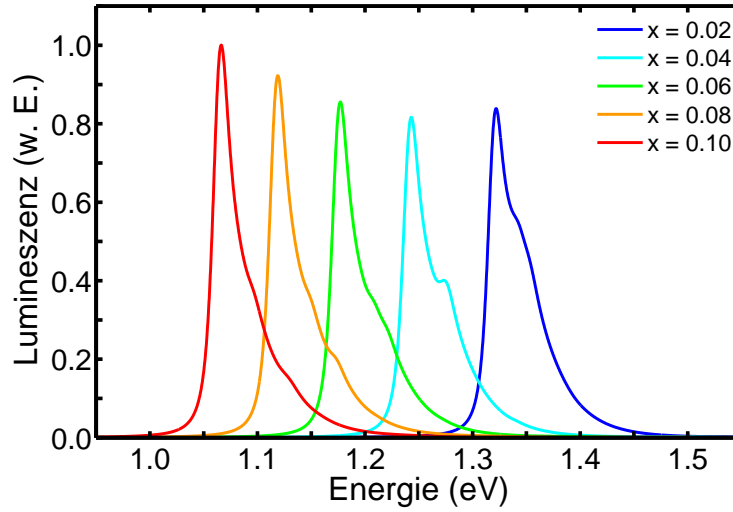


Abbildung 6.1.: Lumineszenzspektren von 12 nm breiten Ga(As_{1-x}Bi_x)/GaAs-Quantenfilmstrukturen mit Bismutkonzentrationen (x) von 2, 4, 6, 8 und 10 %. Die Simulationen sind bei einer Temperatur von 300 K und einer Ladungsträgerdichte von $1 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ durchgeführt, wobei VBAC-Parameter von $C_{\text{Bi}} = 1.6 \text{ eV}$, $E_{\text{Bi,so}} = -1.9 \text{ eV}$, $E_{\text{Bi,hh/lh}} = -0.4 \text{ eV}$, $\Delta E_{\text{so}} = 0.8 \text{ eV}$ und $\Delta E_{\text{hh/lh}} = -1.1 \text{ eV}$ eingesetzt worden sind.

Leichtlochcharakter eine Schulter an der hochenergetischen Seite des Signals aus. Relativ zum Maximum vergrößert sich der Energieabstand der Signatur mit wachsender Bismutkonzentration und wird zunehmend schwächer. Dieser Aspekt erklärt sich dadurch, dass mit der Bismutkonzentration die Verspannung und somit die Aufspaltung der schwerloch- und leichtlochartigen Bänder wächst, so dass die Differenz der Übergangsenergien zunimmt und die Besetzung von Zuständen im leichtlochartigen Subband abnimmt.

Den Berechnungen liegen VBAC-Parameter zugrunde, die [160] entnommen sind. Mit den Werten ($C_{\text{Bi}} = 1.6 \text{ eV}$, $E_{\text{Bi,so}} = -1.9 \text{ eV}$, $E_{\text{Bi,hh/lh}} = -0.4 \text{ eV}$, $\Delta E_{\text{so}} = 0.8 \text{ eV}$, $\Delta E_{\text{hh/lh}} = -1.1 \text{ eV}$) beobachtet man für den vorliegenden Quantenfilmentwurf eine Verschiebung des Lumineszenzsignals von etwa 30 meV pro Prozent Bismut. Da die Emissionswellenlänge stark von den gewählten VBAC-Parametern abhängt, eignet sich eine solche Untersuchung, um die VBAC-Parameter durch den Vergleich mit entsprechenden Experimenten anzupassen. Weitere Studien zum Einfluss der VBAC-Parameter auf die optischen Eigenschaften von Ga(AsBi)-Systemen finden sich in [161].

6.3. Einfluss der Bandanordnung auf die optischen Eigenschaften

Für die Entwicklung von Halbleiterlasern ist die Kenntnis der Versetzung der Bandkanten benachbarter Schichten in der aktiven Region der Heterostruktur von Bedeutung. Im Folgenden wird der Einfluss der Bandanordnung in einem Ga(AsBi)/GaAs-Quantenfilmsystem auf die opti-

schen Eigenschaften analysiert, und es wird eine Methode vorgestellt, wie der Bandkantenverlauf aufgeklärt werden kann.

6.3.1. Leitungsbandoffset

Untersuchungen haben gezeigt, dass GaAs-basierte Quantenfilme aus verdünnt stickstoffhaltigem Ga(NAs), mit denen eines der ersten Systeme mit einem BAC-Verhalten in der elektronischen Bandstruktur erforscht worden ist, einen Valenzbandoffset um 20 % aufweisen [162, 163]. Der Valenzbandoffset beschreibt, zu welchem Anteil die Bandlückendifferenz zwischen der GaAs- und der Ga(NAs)-Schicht, der durch die Kopplung des stickstoffartigen Störstellenbandes mit dem Leitungsband im Quantenfilm bestimmt ist, vom Valenzband getragen wird. Da die Struktur insgesamt einen Bandkantenverlauf mit recht flachen Potentialtöpfen für Elektronen und Löcher formt, beeinflusst der genaue Wert des Bandoffsets die optischen Eigenschaften des Systems signifikant.

Ein zentraler Aspekt besteht also darin, die Versetzung der Bandkanten benachbarter Schichten im Ga(AsBi)/GaAs-System, d. h. die Bandanordnung von Ga(AsBi) auf GaAs, zu charakterisieren. In Analogie zum Ga(NAs)/GaAs-System stellt sich die Frage, inwieweit die bismutin-duzierte Bandlückenreduktion der Ga(AsBi)-Quantenfilmschicht gegenüber den angrenzenden GaAs-Barrieren vom Leitungsband getragen wird.

Um den Einfluss eines möglichen Leitungsbandoffsets im Ga(AsBi)-System auf die optischen Eigenschaften zu analysieren, werden Materialgewinnspektren für verschiedene Bandkonfigurationen mit Hilfe der Halbleiter-Bloch-Gleichungen (Kapitel 2.2.1) ermittelt. Simulationen für einen 10 nm breiten Ga(As_{0.95}Bi_{0.05})-Quantenfilm mit GaAs-Barrieren sind in Abb. 6.2 für verschiedene Ladungsträgerdichten dargestellt. Die Einfügung illustriert dabei die unterschiedlichen Bandanordnungen, die den Berechnungen zugrunde liegen.

Offensichtlich wirkt sich die Wahl des Leitungsbandoffsets kaum auf die Emissionswellenlänge des Systems aus, es sind jedoch Unterschiede in der Abhängigkeit der optischen Verstärkung von der Anregungsintensität zu beobachten: Je größer der Leitungsbandoffset angenommen wird, umso kleiner ist die Ladungsträgerdichte, die aufgebracht werden muss, um den Transparenzpunkt zu überschreiten, und desto höher fällt der optische Materialgewinn aus, der bei einer vorgegebenen Ladungsträgerdichte erzielt wird. Dies erklärt sich dadurch, dass die Lokalisation der Elektronen in der Quantenfilmregion mit zunehmendem Leitungsbandoffset wächst und sich den Löchern angleicht, was sich gerade vorteilhaft auf das Verstärkungsverhalten auswirkt.

Obwohl bei einem Leitungsbandoffset von 0 % die Bandlückenreduktion durch die VBAC-Kopplung ausschließlich vom Valenzband getragen wird und den Elektronen praktisch keine Barriere bleibt, fällt die Gewinnamplitude im Bereich hoher Ladungsträgerdichten aber nur etwas kleiner aus als in der Situation mit einem Leitungsbandoffset von 50 %. Die mikroskopische Analyse zeigt, dass aufgrund der räumlich getrennten Ladungsträgerdichten der Überlapp der Elektron- und Lochwellenfunktion zunächst klein ist, bei hohen Ladungsträgerdichten führt die Coulomb-Anziehung zwischen den räumlich getrennten Ladungsträgerdichten aber zu ei-

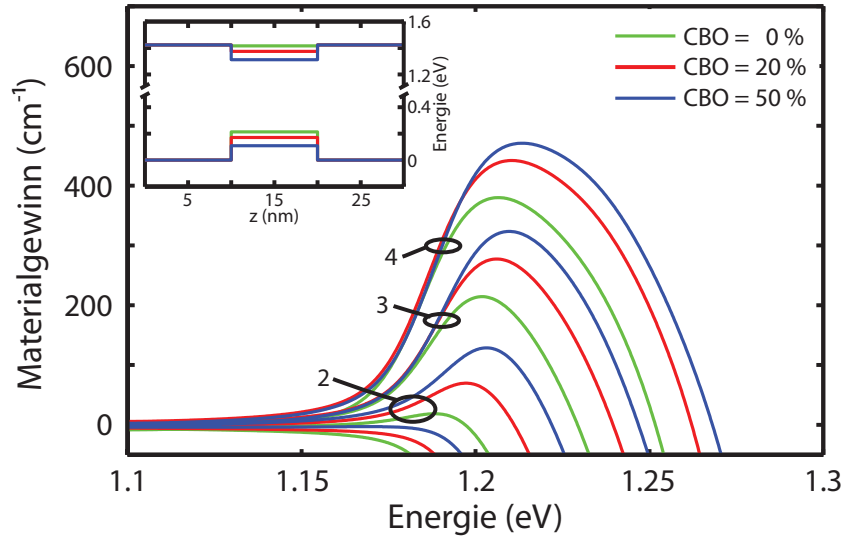


Abbildung 6.2.: Materialgewinnspektren für einen 10 nm breiten Ga(As_{0.95}Bi_{0.05})-Quantenfilm mit GaAs-Barrieren für verschiedene Bandanordnungen bei einer Temperatur von 300 K und einer inhomogenen Verbreiterung von 10 meV, wobei VBAC-Parameter von $C_{Bi} = 1.6$ eV, $E_{Bi,so} = -1.9$ eV, $E_{Bi,hh/lh} = -0.4$ eV, $\Delta E_{so} = 0.8$ eV und $\Delta E_{hh/lh} = -1.1$ eV vorausgesetzt werden. In den Simulationen sind Ladungsträgerdichten von 2, 3, 4 und $5 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ (von unten nach oben) angenommen. Die Einfügung zeigt den Bandkantenverlauf, der den Berechnungen jeweils zugrunde liegt. Es werden Leitungsbandoffsets (CBO) von 0 % (grüne Linien), 20 % (rote Linien) und 50 % (blaue Linien) gewählt.

nem besseren Überlapp und damit zu einem stärkerem optischen Übergang. Auf Grund dessen nehmen die relativen Unterschiede in den Spektren für die verschiedenen Bandanordnungen mit steigender Ladungsträgerdichte ab.

6.3.2. Charakterisierung der Bandanordnung

Sobald geeignete Proben zur Verfügung stehen, bietet sich ein Vergleich theoretischer und experimenteller Spektren an, um Informationen über die Bandanordnung von Ga(AsBi) auf GaAs zu gewinnen. Als Untersuchungsmethode eignet sich speziell eine Form der Modulationsspektroskopie, mit der sich eine Vielzahl von Interbandübergängen aufdecken lässt (Kapitel 4.2 und Kapitel 5.3). Weil die Oszillatorstärke der Übergänge jeweils durch den Überlapp der beteiligten Wellenfunktionen bestimmt ist, und dieser durch die Bandanordnung maßgeblich beeinflusst wird, reagiert ein modulierte Spektrum besonders empfindlich auf eine Änderung des Bandoffsets. So konnte z. B. durch die mikroskopische Analyse elektromodulierter Absorptionsspektren der Leitungsbandoffset zwischen Ga(AsSb) und GaAs mit hoher Genauigkeit bestimmt werden [164].

Um Rückschlüsse auf den Bandkantenverlauf im Ga(AsBi)/GaAs-System zu ziehen, bietet es sich an, die photomodulierte Reflexion (PR), d. h. die anregungsinduzierte Änderung der Reflektivität, einer Probenserie aufzunehmen und im Rahmen der mikroskopischen Theorie zu interpretieren. Vorgestellt wird eine mögliche Untersuchung von Probenstrukturen mit einem

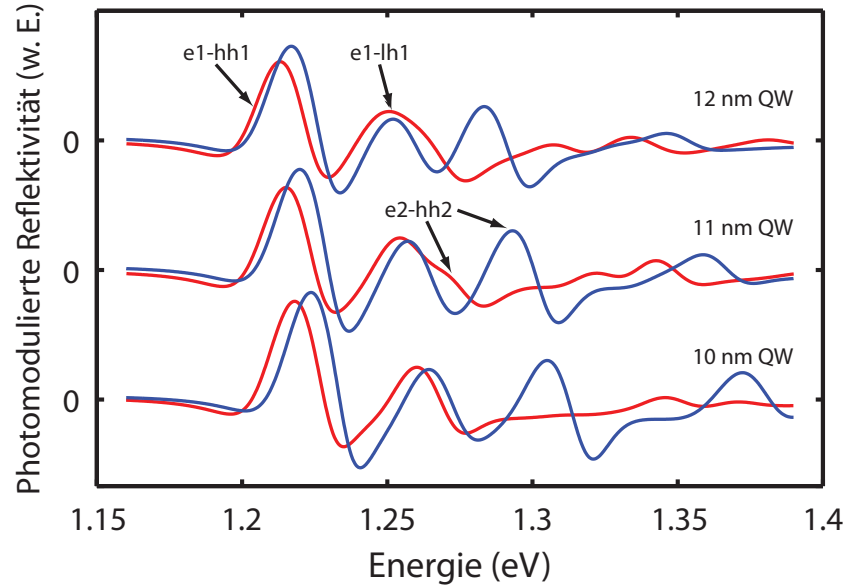


Abbildung 6.3.: PR-Spektren von drei Ga(AsBi)-Quantenfilmstrukturen bei einer Temperatur von 300 K, wobei ein Leitungsbandoffset von 20 % (rote Linien) und 50 % (blaue Linien) gewählt wird. Die zugrunde liegenden Suszeptibilitätsspektren des 12, 11 bzw. 10 nm breiten Ga(As_{0.95}Bi_{0.05})/GaAs-Quantenfilms wurden für je zwei verschiedene Ladungsträgerdichten ermittelt, mit 10 meV inhomogen verbreitert und zur Berechnung der Reflektivitätsspektren einer Barrieren-Quantenfilm-Grenzfläche eingesetzt. Aus der Differenz der Reflektivitätsspektren für die beiden unterschiedlichen Anregungssituationen ergibt sich schließlich das PR-Spektrum. Es werden VBAC-Parameter von $C_{\text{Bi}} = 1.6$ eV, $E_{\text{Bi,so}} = -1.9$ eV, $E_{\text{Bi,hh/lh}} = -0.4$ eV, $\Delta E_{\text{so}} = 0.8$ eV und $\Delta E_{\text{hh/lh}} = -1.1$ eV verwendet. Die Ergebnisse für die verschiedenen Strukturen sind vertikal versetzt dargestellt.

Ga(As_{0.95}Bi_{0.05})-Quantenfilm und GaAs-Barrieren, die sich mit 10, 11 und 12 nm in der Breite der Quantenfilmschichten unterscheiden.

Abb. 6.3 zeigt die PR-Spektren der drei verschiedenen Strukturen, die für eine Bandkonstellation mit einem Leitungsbandoffset von 20 % (rote Linien) und einem Leitungsbandoffset von 50 % (blaue Linien) theoretisch erwartet werden. Sie ergeben sich nach Gl. 4.2 aus der Differenz der Reflektivitätsspektren für zwei unterschiedliche Anregungssituationen der Struktur. Dabei werden die Reflektivitätsspektren nach der Fresnel-Formel (Gl. 4.1) für eine Quantenfilm-Barrieren-Grenzfläche ermittelt. Um die spezifische Brechungsindexdispersion $n(\omega)$ des Quantenfilms einzubinden, wird die optische Suszeptibilität von einem Ga(As_{0.95}Bi_{0.05})/GaAs-Quantenfilm für zwei verschiedene Ladungsträgerdichten berechnet. Als Hintergrundbrechungsindex für Ga(AsBi) kann der Wert von GaAs angenommen werden.

Die verschiedenen Signaturen, die im PR-Spektrum hervortreten, markieren, wie bereits in Kapitel 4.2 erläutert, optische Interbandübergänge hoher Oszillatorstärke. So können für die vorliegenden Ga(AsBi)-Strukturen die Signatur um 1.22 eV auf Übergänge zwischen dem tiefsten Elektron- und dem tiefsten Lochsubband (e1-hh1) und die Signatur um 1.26 eV auf Übergänge zwischen dem tiefsten Elektron- und dem ersten Lochsubband mit vorwiegendem Leichtlochcharakter (e1-lh1) zurückgeführt werden, die sich beide durch hohe optische Dipolmatrixelemente

auszeichnen.

Da elektronische Zustände, die energetisch tief im Potentialtopf liegen, nur wenig durch die Bandanordnung beeinflusst werden, ändert sich die e1-hh1-Resonanz bei einer Variation des Leitungsbandoffsets kaum. Eine Änderung des Bandkantenverlaufs kann aber den höherenergetischen Bereich der Spektren signifikant modifizieren, den höhere Quantenfilmübergänge prägen. Nimmt man einen Leitungsbandoffset von 50 % an, so bildet sich bei einer Energie von 1.28, 1.29 bzw. 1.30 eV ein drittes Signal im PR-Spektrum aus. Die Signatur ist durch den Übergang zwischen dem zweittiefsten Elektron- und dem zweittiefsten Lochsubband (e2-hh2) verursacht, und anhand der PR-Spektren lässt sich verfolgen, wie sein energetischer Abstand zum e1-hh1-Übergang mit zunehmender Quantenfilmbreite reduziert wird. Eine solche Signatur lässt sich im Fall eines Leitungsbandoffsets von 20 % nicht identifizieren. In dieser Situation formt sich aufgrund des flacheren Potentialtopfes für die Elektronen, der mit dem kleineren Leitungsbandoffset verknüpft ist, erst ab einer Quantenfilmbreite von 11 nm ein zweites Elektronsubband. Mit diesem ergibt sich aber eine kleinere e2-hh2-Übergangsenergie, so dass das PR-Signal mit dem der e1-lh1-Resonanz zusammenfällt. Im Fall des 11 nm breiten Quantenfilms kann man den Übergang zwar noch der hochenergetischen Schulter des zweiten Signals zuordnen, aber bei einer Vergrößerung der Breite liegen die e1-h1- und die e2-hh2-Resonanzen schließlich energetisch so dicht, dass sie nicht mehr aufgelöst werden können.

Die Analyse zeigt also, dass gerade die höheren Leitungsbandübergänge des Quantenfilms sensibel auf den Bandoffset reagieren und unterstreicht die Eignung der Methode für die Charakterisierung des Systems. Grundsätzlich ist nicht auszuschließen, dass sich die Bandanordnung mit der chemischen Zusammensetzung des Quantenfilmmaterials ändert, so wie es sich für das Ga(NAs)/GaAs-System herausgestellt hat [163]. Es bietet sich an diesen Aspekt zu untersuchen, indem man neben der Breite des Ga(AsBi)-Quantenfilms die Bismutbeimischung systematisch variiert.

6.4. Optische Verstärkung und Laserverluste

Vergleicht man den Materialgewinn des Ga(AsBi)/GaAs-Systems mit den Werten für konventionelle Laserstrukturen, fällt auf, dass die Amplituden relativ klein sind. Abb. 6.4 zeigt die Spektren für einen 8 nm breiten Ga(As_{0.96}Bi_{0.04})-Quantenfilm mit GaAs-Barrieren (blaue Linien). Gibt man beispielsweise eine Ladungsträgerdichte von $6 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ vor, kann maximal ein Materialgewinn von 750 cm^{-1} erzielt werden. Damit fällt die optische Verstärkung im Vergleich zu einer typischen (GaIn)As-Standardstruktur, die in Abb. 4.7 in Kapitel 4.3.2 bewertet ist und bei einer ähnlichen Wellenlänge um 1.2 eV emittiert, also nur etwa halb so groß aus. Eine Steigerung der Amplitude durch eine weitere Erhöhung der Ladungsträgerdichte ist nur begrenzt möglich, weil die Spektren mit zunehmender Anregungsintensität durch ein weiteres Maximum verbreitert werden, und der Materialgewinn am Laserübergang sättigt. Um den Transparenzpunkt im Ga(As_{0.96}Bi_{0.04})-Quantenfilm überhaupt zu erreichen, muss mit $2 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ außerdem eine fast doppelt so hohe Ladungsträgerdichte wie im (GaIn)As-System aufgebracht werden.

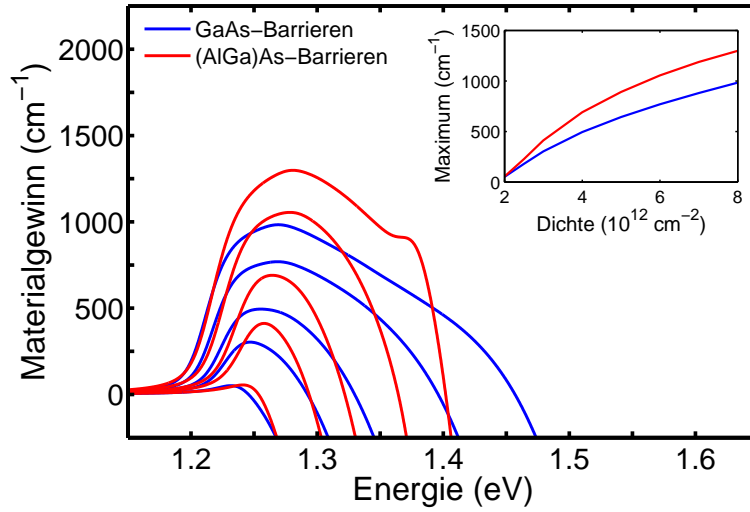


Abbildung 6.4.: Materialgewinnspektren für einen 8 nm breiten $\text{Ga}(\text{As}_{0.96}\text{Bi}_{0.04})$ -Quantenfilm mit GaAs-Barrieren (blaue Linien) und $(\text{Al}_{0.25}\text{Ga}_{0.75})\text{As}$ -Barrieren (rote Linien) bei einer Temperatur von 300 K und einer inhomogenen Verbreiterung von 10 meV, wobei VBAC-Parameter von $C_{\text{Bi}} = 1.6 \text{ eV}$, $E_{\text{Bi,so}} = -1.9 \text{ eV}$, $E_{\text{Bi,hh/lh}} = -0.4 \text{ eV}$, $\Delta E_{\text{so}} = 0.8 \text{ eV}$ und $\Delta E_{\text{hh/lh}} = -1.1 \text{ eV}$ vorausgesetzt werden. In den Simulationen sind jeweils Ladungsträgerdichten von $2, 3, 4, 6$ und $8 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ (von unten nach oben) angenommen. Die Einfügung zeigt das Maximum des Materialgewinns für die Quantenfilmstruktur mit GaAs- und $(\text{Al}_{0.25}\text{Ga}_{0.75})\text{As}$ -Barrieren als Funktion der Ladungsträgerdichte.

Die mikroskopische Analyse zeigt, dass das nachteilige Verstärkungsverhalten des $\text{Ga}(\text{AsBi})$ -Quantenfilms insbesondere in der elektronischen Bandstruktur im Bereich der Leitungsbandkante begründet liegt. Die Elektronsubbänder zeichnen sich durch eine hohe Krümmung aus, die sich deutlicher von der Dispersion der Lochsubbänder unterscheidet als im $(\text{GaIn})\text{As}$ -System, das den optischen Gewinn mit vergleichsweise ähnlichen effektiven Elektron- und Lochmassen begünstigt. Außerdem wird die Einstellung einer Besetzungsinversion im $\text{Ga}(\text{AsBi})$ -System dadurch erschwert, dass die Elektronen nur schwach durch den Quantenfilm gebunden werden, weil der Bandlückenunterschied zwischen der $\text{Ga}(\text{AsBi})$ -Schicht und den benachbarten GaAs-Schichten vorwiegend vom Valenzband getragen wird.

Um die Gewinnamplituden im $\text{Ga}(\text{AsBi})$ -System zu erhöhen, ist es naheliegend, das Layout der Struktur entsprechend anzupassen. Eine Möglichkeit besteht darin, die GaAs-Barrierenschichten durch $(\text{AlGa})\text{As}$ zu ersetzen, denn mit einer geeigneten Aluminiumbeimischung kann die Bandlücke der Barrieren so vergrößert werden, dass schließlich ein tieferer Potentialtopf für die Elektronen geformt wird. Die Materialgewinnspektren einer so modifizierten Struktur sind in Abb. 6.4 gestrichelt eingezeichnet, wobei die Simulationen Barrieren mit einer Aluminiumkonzentration von 25 % voraussetzen. Offensichtlich lässt sich die spektrale Breite der Verstärkung bei einer vorgegebenen Ladungsträgerdichte durch den Austausch der Barrierenschichten reduzieren und in eine höhere Amplitude umsetzen. Maximal stellt der $\text{Ga}(\text{As}_{0.96}\text{Bi}_{0.04})/(\text{Al}_{0.25}\text{Ga}_{0.75})\text{As}$ -Quantenfilm einen Materialgewinn von 1300 cm^{-1} bei einer Emissionswellenlänge um 1.28 eV bereit (Einfügung in Abb. 6.4). Dies entspricht einer Steigerung von etwa 30 % gegenüber der

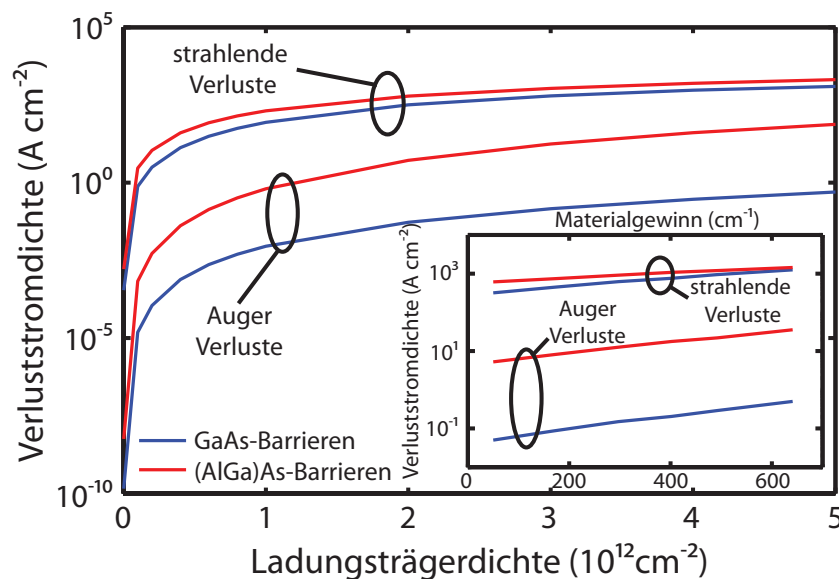


Abbildung 6.5.: Verluststrom durch spontane Emission und Auger-Rekombination als Funktion der Ladungsträgerdichte für den Entwurf mit GaAs-Barrieren (blaue Linien) und $(Al_{0,25}Ga_{0,75})As$ -Barrieren (rote Linien) bei einer Temperatur von 300 K. Die Einfügung zeigt den Verluststrom in Abhängigkeit des Materialgewinns.

optischen Verstärkung, die bei der gleichen Ladungsträgerdichte aus dem $Ga(As_{0,96}Bi_{0,04})/GaAs$ -Quantenfilm extrahiert werden kann.

Neben den Verstärkungseigenschaften werden auch die Ladungsträgerverluste im Ga(AsBi)-System untersucht, die durch spontane Emission und Auger-Rekombinationsprozesse zustandekommen. Ihre Beiträge werden mit dem mikroskopischen Modell berechnet (Kapitel 2.4) und sind in Abb. 6.5 als Funktion der Ladungsträgerdichte aufgetragen. Die Studien zeigen, dass die Auger-Verluste unter den derzeit angenommenen Bandstrukturparametern im Ga(AsBi)-System von zweitrangiger Bedeutung sind, vielmehr dominieren die strahlenden Verluste im gesamten Ladungsträgerdichtebereich, der betrachtet wird.

Für den $Ga(As_{0,96}Bi_{0,04})$ -Quantenfilm mit $(Al_{0,25}Ga_{0,75})As$ -Barrieren ist insgesamt ein höherer Verluststrom zu erwarten als für die Konstellation mit GaAs-Barrieren bei gleicher Ladungsträgerdichte. So verdoppelt sich der strahlende Verluststrom am Transparenzpunkt, wenn man von GaAs zu $(Al_{0,25}Ga_{0,75})As$ als Barrierenmaterial übergeht. In Bezug auf den Auger-Verluststrom fallen die Unterschiede der beiden Entwürfe noch größer aus; sie unterscheiden sich um etwa zwei Größenordnungen. Die drastische Auswirkung der Barrierenzusammensetzung auf die Rekombinationsmechanismen hat sich bereits in der Untersuchung der $(GaIn)Sb$ -Laserstrukturen gezeigt und ist in Kapitel 4.5 im Zusammenhang mit den durchgeführten Designstudien diskutiert worden.

Allerdings wird der Vorteil des niedrigen Verluststroms in der Struktur mit den GaAs-Barrieren durch die im Vergleich zu der Struktur mit den $(Al_{0,25}Ga_{0,75})As$ -Barrieren geringen Gewinnamplituden weitgehend aufgehoben. Dies wird deutlich, wenn man die Verlustströme für beide

Entwürfe als Funktion des Materialgewinns, der mit den jeweils vorgegebenen Ladungsträgerdichten verknüpft ist, aufträgt (Einfügung in Abb. 6.5). Insgesamt muss in beiden Systemen etwa der gleiche Ladungsträgerverluststrom ausgeglichen werden, um eine bestimmte optische Verstärkung aufrecht erhalten zu können. Gerade im Hinblick auf spezifische Anwendung kann eine solche Analyse nützlich sein, um den Anforderungen angepasste Strukturen zu entwickeln.

Zusammenfassung der Ergebnisse und Ausblick

Die mikroskopische Theorie ist mit einem empirischen VBAC-Modell kombiniert worden, um auf diese Weise optoelektronische Eigenschaften von Ga(AsBi)-Quantenfilmsystemen zu analysieren. Das Materialsystem ist insbesondere im Hinblick auf Laseranwendungen interessant, da sich mit dem Einbau eines kleinen Bismutanteils die Emissionswellenlänge über einen weiten Wellenlängenbereich im nahen bis mittleren Infrarot gezielt einstellen lässt.

Da die Material- und Strukturparameter noch weitgehend unbekannt sind, ist deren Einfluss auf die optischen Eigenschaften im Rahmen des mikroskopischen Modells untersucht worden. Sobald experimentelle Daten zur Verfügung stehen, wird man die Wahl der Parameter durch den Vergleich der theoretischen Spektren mit Messungen anpassen können. Photolumineszenzuntersuchungen einer Serie von Quantenfilmstrukturen, deren Bismutkonzentration im Quantenfilmmaterial bei konstanter Quantenfilmbreite variiert wird, ermöglichen es, auf die Stärke der VBAC-Kopplung zu schließen. Um die Bandanordnung von Ga(AsBi) auf GaAs aufzuklären, eignen sich speziell Untersuchungen der photomodulierten Reflexion, denn die mikroskopischen Berechnungen zeigen, dass die Linienform empfindlich auf die Wahl des Bandoffsets reagiert. Somit wird man durch die mikroskopische Analyse gemessener Modulationsspektren Rückschlüsse auf den Bandkantenverlauf ziehen können.

Darüber hinaus sind die Laserverstärkung und die Laserverluste im Ga(AsBi)-System analysiert worden. Die untersuchten Quantenfilmstrukturen zeigen eine Dominanz der strahlenden Verluste gegenüber den Verlusten durch Auger-Rekombinationsmechanismen. Verglichen mit (GaIn)As/GaAs-Standardlaserstrukturen, ergeben sich für den Ga(AsBi)/GaAs-Quantenfilm insgesamt kleinere Gewinnamplituden, was auf die spezifische Banddispersion und insbesondere die flachen Potentialtöpfe in Ga(AsBi)/GaAs-Quantenfilmsystemen zurückzuführen ist. Eine Steigerung der Gewinnamplitude gelingt durch die Verwendung von (AlGa)As als Barrierenmaterial, allerdings bringt dies gleichzeitig höhere Ladungsträgerverluste durch strahlende und Auger-Rekombinationsprozesse mit sich. Betrachtet man die Verluste als Funktion des Materialgewinns, zeigt sich für die beiden unterschiedlichen Entwürfe ein ähnliches Verhalten. Die Analyse demonstriert insgesamt, wie auf der Basis des mikroskopischen Modell ein grundlegendes Verständnis für die Strukturen und die dort stattfinden Prozesse entwickelt werden kann.

Weitere Forschungen und die Realisierung von bismuthaltigen Laserstrukturen erhalten vor dem Hintergrund der mikroskopischen Analyse ihre Legitimation. Der Vorzug des (GaAs)Bi-Materialsystems gegenüber etablierten Lasermaterialien wie (GaIn)As liegt darin, dass mit dem Einbau von Bismut die elektronische Bandstruktur an der Valenbandkante gezielt manipuliert werden kann. Um zusätzlich auch eine weitgehend freie Einstellung des Leitungsbandes zu ermöglichen, sind bereits Ansätze vorgestellt worden, Stickstoff in das System einzubrin-

gen [165, 154]. Mit der Entwicklung von Ga(NAsBi) wird es möglich, die Vorteile von verdünnt stickstoffhaltigen und bismuthaltigen Materialien zu vereinigen.

7. Zusammenfassung

Eine mikroskopische Vielteilchentheorie wird auf verschiedenste Materialsysteme angewendet, die als Verstärkungselement den Grundbaustein von Halbleiterlasersystemen bilden. Das Verständnis der mikroskopischen Prozesse und ihre Modellierung ermöglichen die Analyse und quantitative Prognose optoelektronischer Eigenschaften, die das Laserverhalten maßgeblich bestimmen. Da einige relevante Größen experimentell nur schwer zugänglich sind, bietet sich das mikroskopische Modell an, existierende Strukturen und experimentelle Spektren zu simulieren, um dann auf die noch unbekannten Größen zu schließen. So können Konzepte erarbeitet werden, mit denen Laserdesigns mit Blick auf die Anforderungen spezifischer Anwendungen hin optimiert und weiterentwickelt werden können, und mit denen neuartige Lasersysteme auf ihr Anwendungspotential hin eingeschätzt und bewertet werden können.

Das Fundament für die Analyse bildet ein mikroskopisches Vielteilchenmodell. Auf der Basis der Halbleiter-Bloch-Gleichungen, der Halbleiter-Lumineszenz-Gleichungen und quantenmechanischer Streugleichungen werden Absorptionsspektren, optische Verstärkungsspektren, Lumineszenzspektren und die Ladungsträgerverluste durch strahlende sowie Auger-Rekombinationsprozesse berechnet, wobei Vielteilchenwechselwirkungseffekte explizit in der zweiten Born- und Markov-Näherung berücksichtigt werden. Die erforderlichen elektronischen Eigenzustände und Energieeigenwerte des Quantenfilmsystems werden mit einer 8×8 - $k \cdot p$ -Theorie ermittelt. In das Modell fließen ausschließlich Materialkonstanten, Strukturparameter und eine unordnungsinduzierte, probenspezifische inhomogene Verbreiterung ein; phänomenologische, freie Parameter gehen hingegen nicht ein. Auf diese Weise lassen sich quantitative Voraussagen für die optoelektronischen Eigenschaften von Halbleiterheterostrukturen treffen. Der Einfluss innerstruktureller Resonanzen auf das Absorptions- und Emissionsverhalten wird in die Berechnungen mit einer Transfermatrixmethode bzw. einem Filterfunktionsansatz eingebunden.

Mit dem Modell – und für die spezifischen Randbedingungen des Materialsystems entwickelten Erweiterungen – lassen sich Materialeigenschaften treffend simulieren, wie umfassende Theorie-Experiment-Vergleiche zeigen. Eine Grundlage für solche Simulationen bilden jeweils Berechnungen von Absorption, Verstärkung, Lumineszenz und Laserverlusten. Darauf aufbauend lassen sich nicht nur Lasereigenschaften wie Emissionswellenlängen und Schwellenverhalten ablesen, sondern auch zuweilen mit Hilfe von zusätzlichen modulierten Spektren Strukturparameter bestimmen.

(AlGaIn)As-Verbindungen sind als aktive Halbleitermedien für Laseranwendungen etabliert und werden bereits als Verstärkungselement in VECSEL-Systemen verwendet, die sich zu einer neuen Klasse von Halbleiterlasern entwickeln. Umfassende Übereinstimmungen zwischen theoretischen und experimentellen Spektren beim (AlGaIn)As-basierten Materialsystem zeigen, wie gut

das Modell die optischen Eigenschaften beschreibt. Das Zusammenwirken von Eigenschaften des Mikroresonators und den Absorptions- und Emissionseigenschaften des Quantenfilmmaterials können deshalb mit der mikroskopischen Theorie analysiert und dann isoliert betrachtet werden. Durch die mikroskopische Analyse kann man insbesondere das Potential des optischen *In-Well*-Pumpens für das VECSEL-System an der Laserschwelle einschätzen, und mögliche Einschränkungen durch Sättigungseffekte der Pumpabsorption aufzeigen. Um eine an das *In-Well*-Pumpschema angepasste Struktur zu entwickeln, bietet es sich im nächsten Schritt an, auch die Berechnung von Leistungscharakteristiken auf der Basis der gewonnenen Ergebnisse einzubeziehen.

Halbleiterlaser mit Emissionswellenlängen im langwelligen Bereich um $2\text{ }\mu\text{m}$ lassen sich mit dem (AlGaIn)(AsSb)-basierten Materialsystem realisieren. Berechnungen von photomodulierten Reflektivitätsspektren, optischen Verstärkungsspektren und Laserswellenströmen stimmen mit experimentellen Ergebnissen weitgehend überein, was die Eignung der mikroskopischen Theorie zur Beschreibung der Materialklasse unterstreicht. Das System zeichnet sich durch ausgesprochen hohe Gewinnamplituden aus, die durch die mikroskopische Analyse auf Bandstruktureffekte zurückgeführt werden können. Dem vorteilhaften Materialgewinn stehen hohe Ladungsträgerverluste, insbesondere aufgrund von Auger-Rekombinationsprozessen, gegenüber. Daraus lassen sich Konzepte für Strukturoptimierungen erarbeiten. Da der Auger-Beitrag empfindlich vom Bandkantenverlauf abhängt, lässt sich durch eine geeignete Barrierenkonfiguration eine deutliche Reduktion der Auger-Verluste erreichen. Die Kenntnis dieses Zusammenhangs erweist sich als nützlich, wenn man die Optimierung von Strukturen für Laseranwendungen anstrebt. Die Beiträge von Defekt-, strahlenden und Auger-Verlusten sollten durch experimentelle Untersuchungen, die die Beiträge teilweise aufgliedern, verifiziert werden, um somit die Präzision der Simulationen für die Entwicklung von optimierten Designs steigern zu können.

Mit dem verdünnt stickstoffhaltigen Ga(NAsP)-basierten Materialsystem wird ein Materialsystem untersucht, das sich anders als konventionelle III-V-Verbindungshalbleiter auf Silizium abscheiden lässt, und somit den mikroelektronischen und optoelektronischen Bereich verknüpft. Da mit dem Einbau von Stickstoff eine Veränderung der elektronischen Bandstruktur einhergeht, ist eine Erweiterung der Bandstrukturechnung erforderlich; dabei stellt das BAC-Modell einen zugänglichen und numerisch wenig aufwändigen Lösungsansatz dar. Auf der Basis der damit ermittelten Bandstruktur werden elektromodulierte Reflektivitätsspektren, Photolumineszenzspektren und optische Verstärkungsspektren berechnet, die mit Messungen verglichen werden können. Inwieweit sich das BAC-Modell als geeignet erweist, die Bandstruktur des Materials zu beschreiben, bzw. inwieweit sich die Bandstrukturparameter verfeinert einstellen lassen, werden weitere Theorie-Experiment-Vergleiche zeigen. Nichtsdestotrotz belegen die Untersuchungen, dass sich die optoelektronischen Eigenschaften des Materials grundsätzlich mit der Kombination aus mikroskopischer Theorie und BAC-Modell beschreiben lassen. Nicht zuletzt können auf dieser theoretischen Basis Materialgewinnspektren prognostiziert werden, die einen Vergleich mit konventionellen GaAs-basierten Systemen ermöglichen. Die ähnlich hohen Amplituden bestätigen das Anwendungspotential von Ga(NAsP)-basierten Strukturen für die Realisierung von Lasern auf Siliziumbasis.

Während Stickstoffbeimischungen zu einer signifikanten Modifikation der elektronischen Bandstruktur an der Leitungsbandkante führen, kann mit Bismutbeimischungen die Bandstruktur an der Valenzbandkante gezielt manipuliert werden; die Bandstruktur dieses vollkommen neuartigen Materialsystems wird mit einem VBAC-Modell beschrieben. In Kombination mit dem mikroskopischen Modell werden Photolumineszenzspektren, photomodulierte Reflektivitätsspektren, optische Verstärkungsspektren und die Ladungsträgerverluste von Ga(AsBi)-Quantenfilmstrukturen berechnet. Anhand dieser theoretischen Untersuchungen kann der Einfluss der Material- und Strukturparameter, wie die Bandanordnung von Ga(AsBi) auf GaAs, auf die optoelektronischen Eigenschaften aufgezeigt werden. Außerdem wird mit Berechnungen für Strukturen modifizierter Barrierenzusammensetzung, eine Möglichkeit ausgelotet, die Verstärkungsamplitude des Systems zu steigern. Vor dem Hintergrund der mikroskopischen Prognosen erscheint es zumindest vom theoretischen Standpunkt aus sinnvoll, Ga(AsBi)-Quantenfilme in Lasersystemen zu realisieren.

Die mikroskopische Theorie hat sich insgesamt als geeignete Methode erwiesen, optoelektronische Eigenschaften verschiedenster Halbleiterlaserstrukturen aufzuklären und so zu ihrem physikalischen Verständnis beizutragen. Mit der Kenntnis um diese mikroskopischen Zusammenhänge wird das Laserverhalten auch im Sinne von Prognosen berechenbar.

A. Probenstrukturen

A.1. (AlGaIn)As-basierte VECSEL-Struktur

Schicht	Materialzusammensetzung		Breite (nm)	Brechungsindex
14	Ga(As _{0.90} P _{0.10})	Abdeckung	20.9	3.54 [65]
13	(Al _{0.50} Ga _{0.50})As	Fensterschicht	312.2	3.25 [64]
12	(Al _{0.26} Ga _{0.74})As	Barriere	116.9	3.40 [64]
11	(Al _{0.115} Ga _{0.785} In _{0.10})(As _{0.82} P _{0.18})	Zwischenschicht	5.0	3.51 [14]
10 (x16)	(Al _{0.108} Ga _{0.785} In _{0.107})As	Quantenfilm	10.0	3.56 [14]
9 (x16)	(Al _{0.115} Ga _{0.785} In _{0.10})(As _{0.82} P _{0.18})	Zwischenschicht	5.0	3.51 [14]
8 (x16)	(Al _{0.26} Ga _{0.74})As	Barriere	106.2	3.40 [64]
7 (x16)	(Al _{0.108} Ga _{0.785} In _{0.107})As	Quantenfilm	10.0	3.56 [14]
5	(Al _{0.115} Ga _{0.785} In _{0.10})(As _{0.82} P _{0.18})	Zwischenschicht	5.0	3.51 [14]
4	(Al _{0.26} Ga _{0.74})As	Barriere	94.2	3.40 [64]
3 (x30)	AlAs	Bragg-Spiegel	69.8	2.99 [64]
2 (x30)	(Al _{0.18} Ga _{0.82})As	Bragg-Spiegel	59.9	3.46 [64]
1	GaAs	Pufferschicht	500.0	3.63 [14]
	GaAs	Substrat		

Tabelle A.1.: Aufbau der VECSEL-Struktur. Nominell bestehen die Quantenfilme aus (Al_{0.115}Ga_{0.785}In_{0.10})As [55], im Rahmen der mikroskopischen Analyse wird die Indiumkonzentration aber auf 10.7 % korrigiert. Aufgeführt sind auch die angepassten Breiten sowie die Brechungsindizes der einzelnen Schichten, die in die Simulation eingehen. Die Angaben für die Brechungsindizes beziehen sich dabei auf Werte bei Raumtemperatur für eine Wellenlänge von 850 nm; im Modell wird ihre Abhängigkeit von der Temperatur und der Wellenlänge berücksichtigt.

A.2. (AlGaIn)(AsSb)-basierte Strukturen

Bezeichnung		Quantenfilm	Barrierenmaterial
L7-24	10 nm	(Ga _{0.80} In _{0.20})Sb	(Al _{0.30} Ga _{0.70})Sb
L7-153	9 nm	(Ga _{0.75} In _{0.25})Sb	(Al _{0.30} Ga _{0.70})Sb
L7-156	10 nm	(Ga _{0.75} In _{0.25})Sb	(Al _{0.30} Ga _{0.70})Sb
L7-157	11 nm	(Ga _{0.75} In _{0.25})Sb	(Al _{0.30} Ga _{0.70})Sb
L7-268	10 nm	(Ga _{0.72} In _{0.28})Sb	(Al _{0.30} Ga _{0.70})Sb
Diodenlaser	10 nm	(Ga _{0.78} In _{0.22})Sb	(Al _{0.30} Ga _{0.70})(As _{0.02} Sb _{0.98})
Design A	10 nm	(Ga _{0.78} In _{0.22})Sb	(Al _{0.30} Ga _{0.70})Sb
Design B	12 nm	(Ga _{0.80} In _{0.20})Sb	(Al _{0.25} Ga _{0.75})Sb

Tabelle A.2.: Überblick über die Strukturparameter der Quantenfilme, auf denen die verschiedenen in Kapitel 4 untersuchten Systeme basieren.

A.3. Ga(NAsP)-basierte Strukturen

Bezeichnung	Quantenfilm		Barrierenmaterial	Substrat
Standard	5.0 nm	Ga(N _{0.04} As _{0.90} P _{0.06})	GaP	GaP
23385	5.6 nm	Ga(N _{0.02} As _{0.84} P _{0.14})	GaP	GaP
23388	5.3 nm	Ga(N _{0.02} As _{0.84} P _{0.14})	GaP	GaP
23387	5.0 nm	Ga(N _{0.03} As _{0.92} P _{0.05})	GaP	GaP
23383	6.7 nm	Ga(N _{0.04} As _{0.91} P _{0.05})	GaP	GaP
23384	6.7 nm	Ga(N _{0.04} As _{0.90} P _{0.06})	GaP	GaP
22955	7.0 nm	Ga(N _{0.04} As _{0.86} P _{0.10})	GaP	GaP
15472	4.7 nm	Ga(N _{0.07} As _{0.82} P _{0.11})	3 nm GaP-Zwischenschichten äußere Barrieren aus (BGa)P	Si
15506	4.7 nm	Ga(N _{0.07} As _{0.82} P _{0.11})	3 nm GaP-Zwischenschichten äußere Barrieren aus (BGa)(AsP)	Si

Tabelle A.3.: Überblick über die Strukturparameter der Quantenfilme, auf denen die verschiedenen in Kapitel 5 untersuchten Systeme basieren.

A.4. Ga(AsBi)-basierte Strukturen

Bezeichnung	Quantenfilm	Barrierenmaterial
Struktur 1	12 nm $\text{Ga}(\text{As}_{1-x}\text{Bi}_x)$ $x = 0.02, 0.04, 0.06, 0.08, 0.10$	GaAs
Struktur 2	8 nm $\text{Ga}(\text{As}_{0.96}\text{Bi}_{0.04})$	GaAs
Struktur 3	8 nm $\text{Ga}(\text{As}_{0.96}\text{Bi}_{0.04})$	$(\text{Al}_{0.25}\text{Ga}_{0.75})\text{As}$

Tabelle A.4.: Überblick über die Strukturparameter der Quantenfilme, auf denen die verschiedenen in Kapitel 6 untersuchten Systeme basieren.

Literaturverzeichnis

- [1] AGRAWAL, G. P.: *Semiconductor Lasers: Past, Present and Future*. American Institut of Physics Press Woodbury New York, 1995
- [2] HADER, J. ; MOLONEY, J. V. ; FALLAHI, M. ; FAN, L. ; KOCH, S. W.: Closed-loop design of a semiconductor laser. In: *Optics Letters* 31 (2006), S. 3300
- [3] HADER, J. ; HARDESTY, G. ; WANG, T.-L. ; YARBOROUGH, M. J. ; KANEDA, Y. ; MOLONEY, J. V. ; KUNERT, B. ; STOLZ, W. ; KOCH, S. W.: Predictive Microscopic Modeling of VECSELs. In: *IEEE Journal of Quantum Electronics* 46 (2010), S. 810
- [4] CZYCHOLL, G.: *Theoretische Festkörperphysik (2. Auflage)*. Springer Berlin Heidelberg, 2004
- [5] YU, P. Y. ; CARDONA, M.: *Fundamentals of Semiconductors: Physics and Materials Properties (3rd ed.)*. Springer Berlin Heidelberg New York, 2001
- [6] BURT, M. G.: The justification for applying the effective-mass approximation to microstructures. In: *Journal of Physics: Condensed Matter* 4 (1992), S. 6651
- [7] VOON, L. C. L. Y. ; WILLATZEN, M.: *The $k \cdot p$ Method, Electronic Properties of Semiconductors*. Springer Berlin Heidelberg New York, 2009
- [8] CHOW, W. W. ; KOCH, S. W.: *Semiconductor-Laser Fundamentals: Physics of the Gain Materials*. Springer Berlin Heidelberg New York, 1999
- [9] CARDONA, M. ; CHRISTENSEN, N. E. ; FASOL, G.: Relativistic band structure and spin-orbit splitting of zinc-blende-type semiconductors. In: *Physical Review B* 38 (1988), S. 1806
- [10] HADER, J. ; LINDER, N. ; DÖHLER, G. H.: $k \cdot p$ theory of the Franz-Keldysh effect. In: *Physical Review B* 55 (1997), S. 6960
- [11] PIKUS, G. E. ; BIR, G. L.: Effect of deformation on the hole energy spectrum of germanium and silicon. In: *Soviet Physics - Solid state* 1 (1960), S. 1502. – [Fizika Tverdogo Tela 1 (1959), S. 1642]
- [12] VARSHNI, Y. P.: Temperature dependence of the energy gap in semiconductors. In: *Physica* 34 (1967), S. 149
- [13] LANDOLT-BÖRNSTEIN: *Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology, Group III: Condensed Matter, Volume 41: Semiconductors*. Springer Berlin Heidelberg New York, 2002

- [14] MADELUNG, O.: *Semiconductors - Basic Data (2nd ed.)*. Springer Berlin Heidelberg New York, 1996
- [15] VURGAFTMAN, I. ; MEYER, J. R. ; RAM-MOHAN, L. R.: Band parameters for III–V compound semiconductors and their alloys. In: *Journal of Applied Physics* 89 (2001), S. 5815
- [16] LANDOLT-BÖRNSTEIN: *Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology, Group III: Condensed Matter, Volume 34: Semiconductor Quantum Structures*. Springer Berlin Heidelberg New York, 2002
- [17] JAHNKE, F. ; KIRA, M. ; KOCH, S. W.: Linear and nonlinear optical properties of excitons in semiconductor quantum wells and microcavities. In: *Zeitschrift für Physik B* 104 (1997), S. 559
- [18] HAUG, H. ; KOCH, S. W.: *Quantum Theory of the Optical and Electronic Properties of Semiconductors (4th ed.)*. World Scientific Singapore, 2004
- [19] KIRA, M. ; KOCH, S. W.: Cluster-expansion representation in quantum optics. In: *Physical Review A* 78 (2008), S. 022102
- [20] HADER, J. ; KOCH, S. W. ; MOLONEY, J. V.: Microscopic theory of gain and spontaneous emission in GaInNAs laser material. In: *Solid-State Electronics* 47 (2003), S. 513
- [21] GRINDT, A. ; JAHNKE, F. ; KNORR, A. ; KOCH, S. W. ; CHOW, W. W.: Multi-Band Bloch Equations and Gain Spectra of Highly Excited II–VI Semiconductor Quantum Wells. In: *Physica Status Solidi B* 202 (1997), S. 725
- [22] HADER, J. ; MOLONEY, J. V. ; KOCH, S. W. ; CHOW, W. W.: Microscopic Modeling of Gain and Luminescence in Semiconductors. In: *IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics* 9 (2003), S. 688
- [23] STRINGFELLOW, G. B.: *Organometallic Vapor-Phase Epitaxy: Theory and Practice (2nd ed.)*. Academic Press San Diego London, 1999
- [24] KLEIN, M. V. ; FURTAK, T. E.: *Optik*. Springer Berlin Heidelberg New York, 1988
- [25] KIRA, M. ; JAHNKE, F. ; HOYER, W. ; KOCH, S. W.: Quantum theory of spontaneous emission and coherent effects in semiconductor microstructures. In: *Progress in Quantum Electronics* 23 (1999), S. 189
- [26] KHITROVA, G. ; GIBBS, H. M. ; JAHNKE, F. ; KIRA, M. ; KOCH, S. W.: Nonlinear optics of normal-mode-coupling semiconductor microcavities. In: *Reviews of Modern Physics* 71 (1999), S. 1591
- [27] KIRA, M. ; KOCH, S. W.: Many-body correlations and excitonic effects in semiconductor spectroscopy. In: *Progress in Quantum Electronics* 30 (2006), S. 155
- [28] HOYER, W. ; KIRA, M. ; KOCH, S. W.: Coulomb effects on quantum-well luminescence spectra and radiative recombination times. In: *Journal of the Optical Society of America B* 24 (2007), S. 1344

-
- [29] SCHLICHENMAIER, C.: *Modeling of Optical Properties of Semiconductor Heterostructures*, Philipps-Universität Marburg, Dissertation, 2005
- [30] HADER, J. ; MOLONEY, J. V. ; KOCH, S. W.: Temperature Dependence of Radiative and Auger Losses in Quantum Wells. In: *IEEE Journal of Quantum Electronics* 44 (2008), S. 185
- [31] YABLONOVITCH, E.: Inhibited Spontaneous Emission in Solid-State Physics and Electronics. In: *Physical Review Letters* 58 (1987), S. 2059
- [32] SLUSHER, R. E. ; WEISBUCH, C.: Optical microcavities in condensed matter systems. In: *Solid State Communications* 92 (1994), S. 149
- [33] SCHAFER, M. ; HOYER, W. ; KIRA, M. ; KOCH, S. W. ; MOLONEY, J. V.: Influence of dielectric environment on quantum-well luminescence spectra. In: *Journal of the Optical Society of America B* 25 (2008), S. 187
- [34] HADER, J. ; MOLONEY, J. V. ; KOCH, S. W.: Microscopic Evaluation of Spontaneous Emission and Auger-Processes in Semiconductor Lasers. In: *IEEE Journal of Quantum Electronics* 41 (2005), S. 1217
- [35] BEATTIE, A. R. ; LANDSBERG, P. T.: Auger effect in semiconductors. In: *Proceedings of the Royal Society of London Series A* 249 (1959), S. 16
- [36] KOGELNIK, H. ; LI, T.: Laser Beams and Resonators. In: *Applied Optics* 5 (1966), S. 1550
- [37] KUZNETSOV, M. ; HAKIMI, F. ; SPRAGUE, R. ; MOORADIAN, A.: High-power (>0.5-W CW) diode-pumped vertical-external-cavity surface-emitting semiconductor lasers with circular TEM₀₀ beams. In: *IEEE Photonics Technology Letters* 9 (1997), S. 1063
- [38] KUZNETSOV, M. ; HAKIMI, F. ; SPRAGUE, R. ; MOORADIAN, A.: Design and characteristics of high-power (>0.5-W CW) diode-pumped vertical-external-cavity surface-emitting semiconductor lasers with circular TEM₀₀ beams. In: *IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics* 5 (1999), S. 561
- [39] LE, H. Q. ; DI CECCA, S. ; MOORADIAN, A.: Scalable high-power optically pumped GaAs laser. In: *Applied Physics Letters* 58 (1991), S. 1967
- [40] GIESEN, A. ; HÜGEL, H. ; VOSS, A. ; WITTIG, K. ; BRAUCH, U. ; OPOWER, H.: Scalable Concept for Diode-Pumped High-Power Solid-State Lasers. In: *Applied Physics B* 58 (1994), S. 365
- [41] BEDFORD, R. G. ; KOLESKI, M. ; CHILLA, J. ; REED, M. K. ; NELSON, T. R. ; MOLONEY, J. V.: Power-limiting mechanisms in VECSELs. In: *Enabling Photonics Technologies for Defense, Security, and Aerospace Applications* Bd. 5814, 2005 (Proceedings of the Society of Photo-Optical Instrumentation Engineers (SPIE)), S. 199
- [42] CHILLA, J. ; BUTTERWORTH, S. ; ZEITSCH, A. ; CHARLES, J. ; CAPRARA, A. ; REED,

- M. ; SPINELLI, L.: High power optically pumped semiconductor lasers. In: SCHEPS, R. (Hrsg.) ; HOFFMAN, H. J. (Hrsg.): *Solid State Lasers XIII: Technology and Devices* Bd. 5332, 2004 (Proceedings of the Society of Photo-Optical Instrumentation Engineers (SPIE)), S. 143
- [43] IGA, K.: Surface-Emitting Laser — Its Birth and Generation of New Optoelectronic Field. In: *IEEE Journal on Selected Topics in Quantum Electronics* 6 (2000), S. 1201
- [44] TROPPER, A. C. ; FOREMAN, H. D. ; GARNACHE, A. ; WILCOX, K. G. ; HOOGLAND, S. H.: Vertical-external-cavity semiconductor lasers. In: *Journal of Physics D - Applied Physics* 37 (2004)
- [45] TROPPER, A. C. ; HOOGLAND, S. H.: Extended cavity surface-emitting semiconductor lasers. In: *Progress in Quantum Electronics* 30 (2006), S. 1
- [46] KELLER, U. ; TROPPER, A. C.: Passively modelocked surface-emitting semiconductor lasers. In: *Physics Reports* 429 (2006), S. 67
- [47] SCHULZ, N. ; HOPKINS, J.-M. ; RATTUNDE, M. ; BURNS, D. ; WAGNER, J.: High-brightness long-wavelength semiconductor disk lasers. In: *Laser & Photonics Reviews* 2 (2008), S. 160
- [48] CALVEZ, S. ; HASTIE, J. E. ; GUINA, M. ; OKHOTNIKOV, O. G. ; DAWSON, M. D.: Semiconductor disk lasers for the generation of visible and ultraviolet radiation. In: *Laser & Photonics Reviews* 3 (2009), S. 407
- [49] SCHMID, M. ; BENCHABANE, S. ; TORABI-GOUDARZI, F. ; ABRAM, R. ; FERGUSON, A. I. ; RIIS, E.: Optical in-well pumping of a vertical-external-cavity surface-emitting laser. In: *Applied Physics Letters* 84 (2004), S. 4860
- [50] BEYERTT, S. S. ; ZORN, M. ; KÜBLER, T. ; WENZEL, H. ; WEYERS, M. ; GIESEN, A. ; TRÄNKLE, G. ; BRAUCH, U.: Optical In-Well Pumping of a Semiconductor Disk Laser With High Optical Efficiency. In: *IEEE Journal of Quantum Electronics* 41 (2005), S. 1439
- [51] HOLM, M. A. ; BURNS, D. ; FERGUSON, A. I. ; DAWSON, M. D.: Actively stabilized single-frequency vertical-external-cavity AlGaAs laser. In: *IEEE Photonics Technology Letters* 11 (1999), S. 1551
- [52] HASTIE, J. E. ; HOPKINS, J. M. ; CALVEZ, S. ; JEON, C. W. ; BURNS, D. ; ABRAM, R. ; RIIS, E. ; FERGUSON, A. I. ; DAWSON, M. D.: 0.5-W single transverse-mode operation of an 850-nm diode-pumped surface-emitting semiconductor laser. In: *IEEE Photonics Technology Letters* 15 (2003), S. 894
- [53] HASTIE, J. E. ; CALVEZ, S. ; DAWSON, M. D. ; LEINONEN, T. ; LAAKSO, A. ; LYYTIKÄINEN, J. ; PESSA, M.: High power CW red VECSEL with linearly polarized TEM₀₀ output beam. In: *Optics Express* 13 (2005), S. 77
- [54] HASTIE, J. E. ; MORTON, L. G. ; KEMP, A. J. ; DAWSON, M. D. ; KRYSA, A. B. ; ROBERTS, J. S.: Tunable ultraviolet output from an intracavity frequency-doubled red

- vertical-external-cavity surface-emitting laser. In: *Applied Physics Letters* 89 (2006), S. 061114
- [55] MCGINILY, S. J. ; ABRAM, R. H. ; GARDNER, K. S. ; RIIS, E. ; FERGUSON, A. I. ; ROBERTS, J. S.: Novel Gain Medium Design for Short-Wavelength Vertical-External-Cavity Surface-Emitting Laser. In: *IEEE Journal of Quantum Electronics* 43 (2007), S. 445
- [56] ZHANG, W. ; ACKEMANN, T. ; MCGINILY, S. ; SCHMID, M. ; RIIS, E. ; FERGUSON, A. I.: Operation of an optical in-well-pumped vertical-external-cavity surface-emitting laser. In: *Applied Optics* 45 (2006), S. 7729
- [57] ZAKHARIAN, A. R. ; HADER, J. ; MOLONEY, J. V. ; KOCH, S. W. ; BRICK, P. ; LUTGEN, S.: Experimental and theoretical analysis of optically pumped semiconductor disk lasers. In: *Applied Physics Letters* 83 (2003), S. 1313
- [58] WATTS, R. N. ; WIEMAN, C. E.: Manipulating atomic velocities using diode lasers. In: *Optics Letters* 11 (1986), S. 291
- [59] SALOMON, C. ; DALIBARD, J. ; PHILLIPS, W. D. ; CLAIRON, A. ; GUELLATI, S.: Laser Cooling of Cesium Atoms below $3\text{ }\mu\text{K}$. In: *Europhysics Letters* 12 (1990), S. 683
- [60] WATERS, R. G. ; DALBY, R. J. ; BAUMANN, J. A. ; DE SANCTIS, J. L. ; SHEPARD, A. H.: Dark-line-resistant diode laser at $0.8\text{ }\mu\text{m}$ comprising InAlGaAs strained quantum well. In: *IEEE Photonics Technology Letters* 3 (1991), S. 409
- [61] QU, Y. ; YUAN, S. ; LIU, C. J. ; BO, B. ; LIU, G. ; JIANG, H.: High-power InAlGaAs/GaAs and AlGaAs/GaAs semiconductor laser arrays emitting at 808 nm. In: *IEEE Photonics Technology Letters* 16 (2004), S. 389
- [62] RAJA, M. Y. A. ; BRUECK, S. R. J. ; OSINSKI, M. ; SCHAUS, C. F. ; MCINERNEY, J. G. ; BRENNAN, T. M. ; HAMMONS, B. E.: Resonant Periodic Gain Surface-Emitting Semiconductor Lasers. In: *IEEE Journal of Quantum Electronics* 25 (1989), S. 1500
- [63] CORZINE, S. W. ; GEELS, R. S. ; SCOTT, J. W. ; YAN, R.-H. ; COLDREN, L. A.: Design of Fabry-Perot Surface-Emitting Lasers with a Periodic Gain Structure. In: *IEEE Journal of Quantum Electronics* 25 (1989), S. 1513
- [64] GEHRSTZ, S. ; REINHART, F. K. ; GOURGON, C. ; HERRES, N. ; VONLANTHEN, A. ; SIGG, H.: The refractive index of $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ below the band gap: Accurate determination and empirical modeling. In: *Journal of Applied Physics* 87 (2000), S. 7825
- [65] CLARK, G. D. ; HOLONYAK, N.: Optical properties of Gallium Arsenide-Phosphide. In: *Physical Review* 156 (1967), S. 913
- [66] ZHANG, W. ; McDONALD, A. ; ACKEMANN, T. ; RIIS, E. ; MCCONNELL, G.: Femto-second synchronously in-well pumped vertical-external-cavity surface-emitting laser. In: *Optics Express* 18 (2010), S. 187
- [67] LINDBERG, H. ; STRASSNER, M. ; LARSSON, A.: Improved spectral properties of an

- optically pumped semiconductor disk laser using a thin diamond heat spreader as an intracavity filter. In: *IEEE Photonics Technology Letters* 17 (2005), S. 1363
- [68] KEMP, A. J. ; VALENTINE, G. J. ; HOPKINS, J.-M. ; HASTIE, J. E. ; SMITH, S. A. ; CALVEZ, S. ; DAWSON, M. D. ; BURNS, D.: Thermal management in vertical-external-cavity surface-emitting lasers: finite-element analysis of a heatspreader approach. In: *IEEE Journal of Quantum Electronics* 41 (2005), S. 148
- [69] COLDREN, L. A. ; CORZINE, S. W.: *Diode Lasers and Photonic Integrated Circuits*. Wiley New York, 1995
- [70] HADER, J. ; MOLONEY, J. V. ; KOCH, S. W.: Suppression of carrier recombination in semiconductor lasers by phase-space filling. In: *Applied Physics Letters* 87 (2005), S. 201112
- [71] CHOW, W. W. ; SCHNEIDER, H. C. ; KOCH, S. W. ; CHANG, C. H. ; CHROSTOWSKI, L. ; CHANG-HASNAIN, C. J.: Nonequilibrium Model for Semiconductor Laser Modulation Response. In: *IEEE Journal of Quantum Electronics* 38 (2002), S. 402
- [72] KÜHN, E. ; KOCH, S. W. ; THRÄNHARDT, A. ; HADER, J. ; MOLONEY, J. V.: Microscopic simulation of nonequilibrium features in quantum-well pumped semiconductor disk lasers. In: *Applied Physics Letters* 96 (2010), S. 051116
- [73] KIM, J. G. ; SHTERENGAS, L. ; MARTINELLI, R. U. ; BELENKY, G. L. ; GARBUZOV, D. Z. ; CHAN, W. K.: Room-temperature 2.5 μm InGaAsSb/AlGaAsSb diode lasers emitting 1 W continuous waves. In: *Applied Physics Letters* 81 (2002), S. 3146
- [74] PEASE, E. A. ; DAWSON, L. R. ; VAUGHN, L. G. ; ROTELLA, P. ; LESTER, L. F.: 2.5—3.5 μm optically pumped GaInSb/AlGaInSb multiple quantum well lasers grown on AlInSb metamorphic buffer layers. In: *Journal of Applied Physics* 93 (2003), S. 3177
- [75] RATTUNDE, M. ; SCHMITZ, J. ; KAUFEL, G. ; KELEMEN, M. ; WEBER, J. ; WAGNER, J.: GaSb-based 2.X μm quantum-well diode lasers with low beam divergence and high output power. In: *Applied Physics Letters* 88 (2006), S. 081115
- [76] SCHULZ, N. ; RÖSENER, B. ; MOSER, R. ; RATTUNDE, M. ; MANZ, C. ; KÖHLER, K. ; WAGNER, J.: An improved active region concept for highly efficient GaSb-based optically in-well pumped vertical-external-cavity surface-emitting lasers. In: *Applied Physics Letters* 93 (2008), S. 181113
- [77] ROTTER, T. J. ; TATEBAYASHI, J. ; SENANAYAKE, P. ; BALAKRISHNAN, G. ; RATTUNDE, M. ; WAGNER, J. ; HADER, J. ; MOLONEY, J. V. ; KOCH, S. W. ; DAWSON, L. R. ; HUFFAKER, D. L.: Continuous-Wave, Room-Temperature Operation of 2- μm Sb-Based Optically-Pumped Vertical-External-Cavity Surface-Emitting Laser Monolithically Grown on GaAs Substrates. In: *Applied Physics Express* 2 (2009), S. 112102
- [78] WAGNER, J.: Infrarot-Halbleiterlaser für sensorische und medizinische Anwendungen. In: FRAUNHOFER-INSTITUT FÜR ANGEWANDTE FESTKÖRPERPHYSIK (Hrsg.): *Jahresbericht 2003*. Freiburg, 2004

-
- [79] RATTUNDE, M.: 2.X μm -Hochleistungs-Dioden-Laser. In: FRAUNHOFER-INSTITUT FÜR ANGEWANDTE FESTKÖRPERPHYSIK (Hrsg.): *Jahresbericht 2005*. Freiburg, 2006
- [80] OLESBERG, J. T.: Noninvasive blood glucose monitoring in the 2.0–2.5 μm wavelength range. In: *IEEE/LEOS Conference Proceedings 2* (2001), S. 529
- [81] ROTHMAN, L. S. ; RINSLAND, C. P. ; GLODMAN, A. ; MASSIE, S. T. ; EDWARDS, D. P. ; FLAUD, J.-M. ; PERRIN, A. ; CAMY-PEYRET, C. ; DANA, V. ; MANDIN, J.-Y. ; SCHROEDER, J. ; MCCANN, A. ; GAMACHE, R. R. ; WATTSON, R. B. ; YOSHINO, K. ; CHANCE, K. V. ; JUCKS, K. W. ; BROWN, L. R. ; NEMTCHINOV, V. ; VARANASI, P.: The Hitran Molecular Spectroscopic Database and Hawks (Hitran Atmospheric Workstation): 1996 Edition. In: *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* 60 (1998), S. 665
- [82] MIKHAILOVA, M. P. ; TITKOV, A. N.: Type II heterojunctions in the GaInAsSb/GaSb system. In: *Semiconductor Science and Technology* 9 (1994), S. 1279
- [83] BARANOV, A. N. ; CUMINAL, Y. ; BOISSIER, G. ; NICOLAS, J. C. ; LAZZARI, J. L. ; ALIBERT, C. ; JOULLIÉ, A.: Electroluminescence of GaInSb/GaSb strained single quantum well structures grown by molecular beam epitaxy. In: *Semiconductor Science and Technology* 11 (1996), S. 1185
- [84] FERRINI, R. ; GEDDO, M. ; GUIZZETTI, G. ; PATRINI, M. ; FRANCHI, S. ; BOCCHI, C. ; MUKHAMEDZHANOV, E. K. ; BARALDI, A. ; MAGNANINI, R.: Optical study of $\text{Al}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{Sb}/\text{GaSb}$ single quantum wells. In: *Physical Review B* 59 (1999), S. 15395
- [85] BOTTAZZI, C. ; PARISINI, A. ; TARRICONE, L. ; MAGNANINI, R. ; BARALDI, A.: Optical properties of $\text{GaSb}/\text{Al}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{Sb}$ multiple quantum wells. In: *Physical Review B* 62 (2000), S. 2731
- [86] GANGYI, X. ; AIZHEN, L.: Optical gain of InGaAsSb/AlGaAsSb type-I long wavelength quantum-well lasers. In: *Semiconductor Science and Technology* 18 (2003), S. 827
- [87] WHITE, S. R. ; SHAM, L. J.: Electronic Properties of Flat-Band Semiconductor Heterostructures. In: *Physical Review Letters* 47 (1981), S. 879
- [88] KOLOKOLOV, K. I. ; LI, J. ; NING, C. Z.: $k \cdot p$ Hamiltonian without spurious-state solutions. In: *Physical Review B* 68 (2003), S. 161308
- [89] HUANG, S. H. ; BALAKRISHNAN, G. ; KHOSHAKHLAGH, A. ; JALLIPALLI, A. ; DAWSON, L. R. ; HUFFAKER, D. L.: Strain relief by periodic misfit arrays for low defect density GaSb on GaAs. In: *Applied Physics Letters* 88 (2006), S. 131911
- [90] WANG, E. Y. ; ALBERS, W. A. ; BLEIL, C. E.: Light-modulated Reflectance of Semiconductors. In: THOMAS, D. G. (Hrsg.): *Proceedings of the International Conference on II-VI Semiconducting Compounds, Providence, Rhode Island 1967*, W. A. Benjamin Inc. New York, 1968, S. 136
- [91] NAHORY, R. E. ; SHAY, J. L.: Reflectance modulation by the surface field in GaAs. In: *Physical Review Letters* 21 (1968), S. 1569

- [92] MISIEWICZ, J. ; SITAREK, P. ; SEK, G. ; KUDRAWIEC, R.: Semiconductor heterostructures and device structures investigated by photoreflectance spectroscopy. In: *Material Science Poland* 21 (2003), S. 263
- [93] GAY, J. G. ; KLAUDER, L. T.: Mechanism for the Photoreflectance Effect. In: *Physical Review* 172 (1968), S. 811
- [94] ALBERS, W. A.: Screening of bound-state excitons in modulated reflectance. In: *Physical Review Letters* 23 (1969), S. 410
- [95] SHAY, J. L.: Photoreflectance Line Shape at the Fundamental Edge in Ultrapure GaAs. In: *Physical Review B* 2 (1970), S. 803
- [96] SCHLICHENMAIER, C. ; GRÜNING, H. ; TRÄNHARDT, A. ; KLAR, P. J. ; KUNERT, B. ; VOLZ, K. ; STOLZ, W. ; HEIMBRODT, W. ; MEIER, T. ; KOCH, S. W. ; HADER, J. ; MOLONEY, J. V.: Type I-type II transition in InGaAs–GaNAs heterostructures. In: *Applied Physics Letters* 86 (2005), S. 081903
- [97] HECHT, E.: *Optik (4. Auflage)*. Oldenbourg-Verlag München, 2005
- [98] ADACHI, S.: Band gaps and refractive indices of AlGaAsSb, GaInAsSb and InPAsSb: Key properties for a variety of the 2–4- μ m optoelectronic device applications. In: *Journal of Applied Physics* 61 (1987), S. 4869
- [99] JAKOWETZ, W. ; RÜHLE, W. ; BREUNINGER, K. ; PILKUHN, M.: Luminescence and Photoconductivity of Undoped p-GaSb. In: *Physica Status Solidi A* 12 (1972), S. 169
- [100] HAKKI, B. W. ; PAOLI, T. L.: Gain spectra in GaAs double-heterostructure injection lasers. In: *Journal of Applied Physics* 46 (1975), S. 1299
- [101] CASSIDY, D. T.: Technique for measurement of the gain spectra of semiconductor diode lasers. In: *Journal of Applied Physics* 56 (1984), S. 3096
- [102] WINTNER, E. ; IPPEN, E. P.: Nonlinear carrier dynamics in $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}$ compounds. In: *Applied Physics Letters* 44 (1984), S. 999
- [103] TAKESHIMA, M.: Effect of Auger recombination on laser operation on $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$. In: *Journal of Applied Physics* 58 (1985), S. 3846
- [104] MEYER, J. R. ; FELIX, C. L. ; BEWLEY, W. W. ; VURGAFTMAN, I. ; AIFER, E. H. ; OLAFSEN, L. J. ; LINDLE, J. R. ; HOFFMANN, C. A. ; YANG, M.-J. ; BENNETT, B. R. ; SHANABROOK, B. V. ; LEE, H. ; LIN, C. H. ; PEI, S. S. ; MILES, R. H.: Auger coefficients in type-II InAs/ $\text{Ga}_{1-x}\text{In}_x\text{Sb}$ quantum wells. In: *Applied Physics Letters* 73 (1998), S. 2857
- [105] RATTUNDE, M.: *Infrarot-Diodenlaser auf der Basis der III-V-Antimonide*, Albert-Ludwigs-Universität Freiburg i. Br., Dissertation, 2003
- [106] FEHSE, R. ; TOMIĆ, S. ; ADAMS, A. R. ; SWEENEY, S. J. ; O'REILLY, E. P. ; ANDREEV, A. ; RIECHERT, H.: A quantitative study of radiative, Auger, and defect related recombination processes in 1.3- μ m GaInNAs-based quantum-well lasers. In: *IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics* 8 (2002), S. 801

-
- [107] CHANG, H.-H. ; FANG, A. W. ; SYSAK, M. N. ; PARK, H. ; JONES, R. ; COHEN, O. ; RADAY, O. ; PANICCIA, M. J. ; BOWERS, J. E.: 1310nm silicon evanescent laser. In: *Optics Express* 15 (2007), S. 11466
- [108] PAVESI, L. (Hrsg.) ; GAPONENKO, S. (Hrsg.) ; DAL NEGRO, L. (Hrsg.): *Towards the first silicon laser*. Kluwer Academic Publishers Dodrecht Boston London, 2003
- [109] RONG, H. ; JONES, R. ; LIU, A. ; COHEN, O. ; HAK, D. ; FANG, A. ; PANICCIA, M.: A continuous-wave Raman silicon laser. In: *Nature* 433 (2005), S. 725
- [110] LIU, J. ; SUN, X. ; CAMACHO-AGUILERA, R. ; KIMERLING, L. C. ; MICHEL, J.: Ge-on-Si laser operating at room temperature. In: *Optics Letters* 35 (2010), S. 679
- [111] KUNERT, B. ; VOLZ, K. ; KOCH, J. ; STOLZ, W.: Direct-band-gap Ga(NAsP)-material system pseudomorphically grown on GaP substrate. In: *Applied Physics Letters* 88 (2006), S. 182108
- [112] BORCK, S. ; CHATTERJEE, S. ; K. VOLZ, B. K. ; STOLZ, W. ; HEBER, J. ; RÜHLE, W. W.: Lasing in optically pumped Ga(NAsP)/GaP heterostructures. In: *Applied Physics Letters* 89 (2006), S. 031102
- [113] KUNERT, B. ; KLEHR, A. ; REINHARDT, S. ; VOLZ, K. ; STOLZ, W.: Near room temperature electrical injection lasing for dilute nitride Ga(NAsP)/GaP quantum-well structures grown by metal organic vapour phase epitaxy. In: *Electronics Letters* 42 (2006), S. 601
- [114] LIEBICH, S. ; ZIMPRICH, M. ; LUDEWIG, P. ; BEYER, A. ; KUNERT, B. ; HOSSAIN, N. ; JIN, S. R. ; SWEENEY, S. J. ; VOLZ, K. ; STOLZ, W.: MOVPE growth and characterization of Ga(NAsP) laser structures monolithically integrated on Si (001) substrates. In: *IEEE 22nd International Semiconductor Laser Conference*, 2010
- [115] KUNERT, B. ; VOLZ, K. ; KOCH, J. ; STOLZ, W.: MOVPE growths conditions of the novel direct band gap, dilute nitride Ga(NAsP) material system pseudomorphically strained on GaP-substrate. In: *Journal of Crystal Growth* 298 (2007), S. 121
- [116] KUNERT, B. ; TRUSHEIM, D. ; VOSSEBÜRGER, V. ; VOLZ, K. ; STOLZ, W.: Annealing experiments of the GaP based dilute nitride Ga(NAsP). In: *Physica Status Solidi A* 205 (2008), S. 114
- [117] RIEDEL, E. ; JANIÁK, C.: *Anorganische Chemie (7. Auflage)*. de Gruyter Berlin, 2007
- [118] HJALMARSON, H. P. ; VOGL, P. ; WOLFORD, D. J. ; DOW, J. D.: Theory of Substitutional Deep Traps in Covalent Semiconductors. In: *Physical Review Letters* 44 (1980), S. 810
- [119] SHAN, W. ; WALUKIEWICZ, W. ; AGER, J. W. ; HALLER, E. E. ; GEISZ, J. F. ; FRIEDMAN, D. J. ; OLSON, J. M. ; KURTZ, S. R.: Band Anticrossing in GaInNAs Alloys. In: *Physical Review Letters* 82 (1999), S. 1221
- [120] KLAR, P. J.: Recent developments in metastable dilute-N III–V semiconductors. In: *Progress in Solid State Chemistry* 31 (2003), S. 301
- [121] O'REILLY, E. P. ; LINDSAY, A.: $k \cdot P$ Model of Ordered $\text{GaN}_x\text{As}_{1-x}$. In: *Physica Status*

- Solids B* 216 (1999), S. 131
- [122] LINDSAY, A. ; O'REILLY, E. P.: Theory of enhanced bandgap non-parabolicity in $\text{GaN}_x\text{As}_{1-x}$ and related alloys. In: *Solid State Communications* 112 (1999), S. 443
 - [123] KENT, P. R. C. ; ZUNGER, A.: Theory of electronic structure evolution in GaAsN and GaPN alloys. In: *Physical Review B* 64 (2001), S. 115208
 - [124] GRÜNING, H. ; KOHARY, K. ; BARANOVSKII, S. D. ; RUBEL, O. ; KLAR, P. J. ; RAMAKRISHNAN, A. ; EBBINGHAUS, G. ; THOMAS, P. ; HEIMBRODT, W. ; STOLZ, W. ; RÜHLE, W. W.: Hopping relaxation of excitons in GaInNAs/GaNAs quantum wells. In: *Physica Status Solidi C* 1 (2004), S. 109
 - [125] RUBEL, O. ; GALLUPPI, M. ; BARANOVSKII, S. D. ; VOLZ, K. ; GEELHAAR, L. ; RIECHERT, H. ; THOMAS, P. ; STOLZ, W.: Quantitative description of disorder parameters in (GaIn)(NAs) quantum wells from the temperature-dependent photoluminescence spectroscopy. In: *Journal of Applied Physics* 98 (2005), S. 063518
 - [126] HADER, J. ; KOCH, S. W. ; MOLONEY, J. V. ; O'REILLY, E. P.: Influence of the valence-band offset on gain and absorption in GaNAs/GaAs quantum well lasers. In: *Applied Physics Letters* 76 (2000), S. 3685
 - [127] HADER, J. ; KOCH, S. W. ; MOLONEY, J. V. ; O'REILLY, E. P.: Gain in 1.3 μm materials: InGaNAs and InGaPAs semiconductor quantum-well lasers. In: *Applied Physics Letters* 77 (2000), S. 630
 - [128] HOFMANN, M. ; WAGNER, A. ; ELLMERS, C. ; SCHLICHENMEIER, C. ; SCHÄFER, S. ; HÖHNSDORF, F. ; KOCH, J. ; STOLZ, W. ; KOCH, S. W. ; RÜHLE, W. W. ; HADER, J. ; MOLONEY, J. V. ; O'REILLY, E. P. ; BORCHERT, B. ; EGOROV, A. Y. ; RIECHERT, H.: Gain Spectra of (GaIn)(NAs) laser diodes for the 1.3- μm -wavelength regime. In: *Applied Physics Letters* 78 (2001), S. 3009
 - [129] THRÄNHARDT, A. ; KUZNETSOVA, I. ; SCHLICHENMAIER, C. ; KOCH, S. W. ; SHTERENGAS, L. ; BELENKY, G. ; YEH, J.-Y. ; MAWST, L. J. ; TANSU, N. ; HADER, J. ; MOLONEY, J. V. ; CHOW, W. W.: Nitrogen incorporation effects on gain properties of GaInNAs lasers: Experiment and theory. In: *Applied Physics Letters* 86 (2005), S. 201117
 - [130] KARCHER, C. ; GRÜNING, H. ; GÜNGERICH, M. ; KLAR, P. J. ; VOLZ, K. ; STOLZ, W. ; HEIMBRODT, W.: Optical properties of Ga(NAsP) lattice matched to Si. In: *Physica Status Solidi C* 6 (2009), S. 2638
 - [131] CHAMINGS, J. ; ADAMS, A. R. ; SWEENEY, S. J. ; KUNERT, B. ; VOLZ, K. ; STOLZ, W.: Temperature dependence and physical properties of Ga(NAsP)/GaP semiconductor lasers. In: *Applied Physics Letters* 93 (2008), S. 101108
 - [132] CHAMINGS, J. ; AHMED, S. ; ADAMS, A. R. ; SWEENEY, S. J. ; ODNOLYUDOV, V. A. ; TU, C. W. ; KUNERT, B. ; STOLZ, W.: Band anti-crossing and carrier recombination in dilute nitride phosphide based lasers and light emitting diodes. In: *Physica Status Solidi B* 246 (2009), S. 527

-
- [133] KUDRAWIEC, R.: Parameterization of energy gap at the Γ point and outside this point for dilute nitrides: $\text{Ga}_{1-y}\text{In}_y\text{N}_x\text{P}_{1-x}$ and $\text{GaN}_x\text{As}_{1-x-z}\text{P}_z$ alloys. In: *Journal of Applied Physics* 105 (2009), S. 063529
- [134] O'REILLY, E. P. ; LINDSAY, A. ; TOMIĆ, S. ; KAMAL-SAAD, M.: Tight-binding and $k \cdot p$ models for the electronic structure of Ga(In)NAs and related alloys. In: *Semiconductor Science and Technology* 17 (2002), S. 870
- [135] LIU, X. ; PISTOL, M.-E. ; SAMUELSON, L. ; SCHWETLICK, S. ; SEIFERT, W.: Nitrogen pair luminescence in GaAs. In: *Applied Physics Letters* 56 (1990), S. 1451
- [136] THOMAS, D. G. ; HOPFIELD, J. J.: Isoelectronic traps due to nitrogen in gallium phosphide. In: *Physical Review B* 150 (1966), S. 680
- [137] SHANTHARAMA, L. G. ; ADAMS, A. R. ; AHMAD, C. N. ; NICHOLAS, R. J.: The $k \cdot p$ interaction on InP and GaAs from the band-gap dependence of the effective mass. In: *Journal of Physics C: Solid State Physics* 17 (1984), S. 4429
- [138] LIU, X. ; PISTOL, M.-E. ; SAMUELSON, L.: Excitons bound to nitrogen pairs in GaAs. In: *Physical Review B* 42 (1990), S. 7504
- [139] KLAR, P. J. ; GRÜNING, H. ; HEIMBRODT, W. ; KOCH, J. ; HÖHNSDORF, F. ; STOLZ, W. ; VICENTE, P. M. A. ; CAMASSEL, J.: From N isoelectronic impurities to N-induced bands in the $\text{GaN}_x\text{As}_{1-x}$ alloy. In: *Applied Physics Letters* 76 (2000), S. 3439
- [140] ASPNES, D. E.: Direct Verification of the Third-Derivative Nature of Electoreflectance Spectra. In: *Physical Review Letters* 28 (1972), S. 168
- [141] SERAPHIN, B. O. ; ASPNES, D. E.: Electric Field Effects in Optical and First-Derivative Modulation Spectroscopy. In: *Physical Review B* 6 (1972), S. 3158
- [142] ASPNES, D. E.: Third-derivative modulation spectroscopy with low-field electoreflectance. In: *Surface Science* 37 (1973), S. 418
- [143] MILLER, D. A. B. ; CHEMLA, D. S. ; DAMEN, T. C. ; GOSSARD, A. C. ; WIEGMANN, W. ; WOOD, T. H. ; BURRUS, C. A.: Band-Edge Electroabsorption in Quantum Well Structures: The Quantum-Confined Stark Effect. In: *Physical Review Letters* 53 (1984), S. 2173
- [144] GLEMBOCKI, O. J. ; SHANABROOK, B. V.: Photoreflectance spectroscopy of microstructures. In: *Semiconductors and Semimetals* (1992)
- [145] KARCHER, C.: *Optische Spektroskopie an Ga(N,As,P)GaP Quantenfilmstrukturen*, Philipps-Universität Marburg, Diplomarbeit, 2007
- [146] HADER, J. ; MOLONEY, J. V. ; KOCH, S. W.: Density-activated defect recombination as a possible explanation for the efficiency droop in GaN-based diodes. In: *Applied Physics Letters* 96 (2010), S. 221106
- [147] KUNERT, B. ; ZINNKAN, S. ; VOLZ, K. ; STOLZ, W.: Monolithic integration of Ga(NAsP)/(BGa)P multi-quantum well structures on (0 0 1) silicon substrate by MOVPE.

- In: *Journal of Crystal Growth* 310 (2008), S. 4776
- [148] HVAM, J. M.: Direct recording of optical-gain spectra from ZnO. In: *Journal of Applied Physics* 49 (1978), S. 3124
 - [149] LANGE, C. ; SCHWALM, M. ; CHATTERJEE, S. ; RÜHLE, W. W. ; GERHARDT, N. C. ; JOHNSON, S. R. ; WANG, J.-B. ; ZHANG, Y.-H.: The variable stripe-length method revisited: Improved analysis. In: *Applied Physics Letters* 91 (2007), S. 191107
 - [150] HANGLEITER, A. ; HITZEL, F. ; NETZEL, C. ; FUHRMANN, D. ; ROSSOW, U. ; ADE, G. ; HINZE, P.: Suppression of Nonradiative Recombination by V-Shaped Pits in GaInN/GaN Quantum Wells Produces a Large Increase in the Light Emission Efficiency. In: *Physical Review Letters* 95 (2005), S. 127402
 - [151] O'REILLY, E. P. ; LINDSAY, A. ; FAHY, S.: Theory of the electronic structure of dilute nitride alloys: beyond the band-anti-crossing model. In: *Journal of Physics: Condensed Matter* 16 (2004), S. 3257
 - [152] TIXIER, S. ; ADAMCYK, M. ; TIEDJE, T. ; FRANCOEUR, S. ; MASCARENHAS, A. ; WEI, P. ; SCHIETTEKATTE, F.: Molecular beam epitaxy growth of GaAs_{1-x}Bi_x. In: *Applied Physics Letters* 82 (2003), S. 2245
 - [153] FRANCOEUR, S. ; SEONG, M.-J. ; MASCARENHAS, A. ; TIXIER, S. ; ADAMCYK, M. ; TIEDJE, T.: Band gap of GaAs_{1-x}Bi_x, 0<x<3.6%. In: *Applied Physics Letters* 82 (2003), S. 3874
 - [154] HUANG, W. ; OE, K. ; FENG, G. ; YOSHIMOTO, M.: Molecular-beam epitaxy and characteristics of GaN_yAs_{1-x-y}Bi_x. In: *Journal of Applied Physics* 98 (2005), S. 053505
 - [155] JANOTTI, A. ; WEI, S.-H. ; ZHANG, S. B.: Theoretical study of the effects of isovalent coalloying of Bi and N in GaAs. In: *Physical Review B* 65 (2002), S. 115203
 - [156] FERHAT, M. ; ZAOUI, A.: Structural and electronic properties of III-V bismuth compounds. In: *Physical Review B* 73 (2006), S. 115107
 - [157] LU, X. ; BEATON, D. A. ; LEWIS, R. B. ; T. TIEDJE ; ZHANG, Y.: Composition dependence of photoluminescence of GaAs_{1-x}Bi_x alloys. In: *Applied Physics Letters* 95 (2009), S. 041903
 - [158] MASCARENHAS, A. ; KINI, R. ; ZHANG, Y. ; FRANCE, R. ; PTAK, A.: Comparison of the dilute bismide and nitride alloys GaAsBi and GaAsN. In: *Physica Status Solidi B* 246 (2009), S. 504
 - [159] WU, J. ; SHAN, W. ; WALUKIEWICZ, W.: Band anticrossing in highly mismatched III-V semiconductor alloys. In: *Semiconductor Science and Technology* 17 (2002), S. 860
 - [160] ALBERI, K. ; WU, J. ; WALUKIEWICZ, W. ; YU, K. M. ; DUBON, O. D. ; WATKINS, S. P. ; WANG, C. X. ; LIU, X. ; CHO, Y.-J. ; FURDYNA, J.: Valence-band anticrossing in mismatched III-V semiconductor alloys. In: *Physical Review B* 75 (2007), S. 045203
 - [161] IMHOF, S.: *Mikroskopische Modellierung dichteabhängiger Photoreflektionsspektren in*

Halbleiter-Heterostrukturen, Philipps-Universität Marburg, Diplomarbeit, 2008

- [162] KLAR, P. J. ; GRÜNING, H. ; HEIMBRODT, W. ; KOCH, J. ; STOLZ, W. ; VICENTE, P. M. A. ; SAADI, A. M. K. ; LINDSAY, A. ; O'REILLY, E. P.: Pressure and Temperature Dependent Studies of $\text{GaN}_x\text{As}_{1-x}/\text{GaAs}$ Quantum Well Structures. In: *Physica Status Solidi B* 223 (2001), S. 163
- [163] TOMIČ, S. ; O'REILLY, E. P. ; KLAR, P. J. ; GRÜNING, H. ; HEIMBRODT, W. ; CHEN, W. M. ; BUYANOVA, I. A.: Influence of conduction-band nonparabolicity on electron confinement and effective mass in $\text{GaN}_x\text{As}_{1-x}/\text{GaAs}$ quantum wells. In: *Physical Review B* 69 (2004), S. 245305
- [164] BÜCKERS, C. ; BLUME, G. ; THRÄNHARDT, A. ; SCHLICHENMAIER, C. ; KLAR, P. J. ; WEISER, G. ; KOCH, S. W. ; HADER, J. ; MOLONEY, J. V. ; HOSEA, T. J. C. ; SWEENEY, S. J. ; WANG, J.-B. ; JOHNSON, S. R. ; ZHANG, Y.-H.: Microscopic electroabsorption line shape analysis for $\text{Ga}(\text{AsSb})/\text{GaAs}$ heterostructures. In: *Journal of Applied Physics* 101 (2007), S. 033118
- [165] TIXIER, S. ; WEBESTER, S. E. ; YOUNG, E. C. ; TIEDJE, T. ; FRANCOEUR, S. ; MASCARENHAS, A. ; WEI, P. ; SCHIETTEKATTE, F.: Band gaps of the dilute quaternary alloys $\text{GaN}_x\text{As}_{1-x-y}\text{Bi}_y$ and $\text{Ga}_{1-y}\text{In}_y\text{N}_x\text{As}_{1-x}$. In: *Applied Physics Letters* 86 (2005), S. 112113

Veröffentlichungen

Zeitschriftenbeiträge

- C. Bückers, E. Kühn, C. Schlichenmaier, S. Imhof, A. Thränhardt, J. Hader, J. V. Moloney, O. Rubel, W. Zhang, T. Ackemann und S. W. Koch: *Quantum modeling of semiconductor gain materials and vertical-external-cavity surface-emitting laser systems*. In: Physica Status Solidi B 247 (2010), S. 789, eingeladener Beitrag
- E. Kühn, A. Thränhardt, C. Bückers, S. W. Koch, J. Hader und J. V. Moloney: *Numerical study of the influence of an antireflection coating on the operating properties of vertical-external-cavity surface-emitting lasers*. In: Journal of Applied Physics 106 (2009), S. 063105
- C. Bückers, S. Imhof, A. Thränhardt, J. Hader, J. V. Moloney und S. W. Koch: *Microscopic Modeling of Quantum Well Gain Media for VECSEL Applications*. In: IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics 15 (2009), S. 984, eingeladener Beitrag
- S. Horst, S. Chatterjee, K. Hantke, P. J. Klar, I. Nemeth, W. Stolz, K. Volz, C. Bückers, A. Thränhardt, S. W. Koch, W. Rühle, S. R. Johnson, J.-B. Wang und Y.-H. Zhang: *Ga(AsSb)/GaAs/(AlGa)As heterostructures: additional hole-confinement due to quantum islands*. In: Physica Status Solidi C 6 (2009), S. 411
- S. Imhof, C. Bückers, A. Thränhardt, J. Hader, J. V. Moloney und S. W. Koch: *Microscopic theory of the optical properties of Ga(AsBi)/GaAs quantum wells*. In: Semiconductor Science and Technology 23 (2008), S. 125009
- S. Horst, S. Chatterjee, K. Hantke, P. J. Klar, I. Nemeth, W. Stolz, K. Volz, C. Bückers, A. Thränhardt, S. W. Koch, W. Rühle, S. R. Johnson, J.-B. Wang und Y.-H. Zhang: *Hole confinement in quantum islands in Ga(AsSb)/GaAs/(AlGa)As heterostructures*. In: Applied Physics Letters 92 (2008), S. 161101, ausgewählt für „Virtual Journal of Nanoscale Science and Technology“ (Mai 2008)
- C. Bückers, A. Thränhardt, S. W. Koch, M. Rattunde, N. Schulz, J. Wagner, J. Hader und J. V. Moloney: *Microscopic calculation and measurement of the laser gain in a (GaIn)Sb quantum well structure*. In: Applied Physics Letters 92 (2008), S. 071107
- C. Bückers, G. Blume, A. Thränhardt, C. Schlichenmaier, P. J. Klar, G. Weiser, S. W. Koch, J. Hader, J. V. Moloney, T. J. C. Hosea, S. J. Sweeney, J.-B. Wang, S. R. Johnson und Y.-H. Zhang: *Microscopic electroabsorption line shape analysis for Ga(AsSb)/GaAs heterostructures*. In: Journal of Applied Physics 101 (2007), S. 033118

A. Thränhardt, C. Bückers, C. Schlichenmaier, I. Kuznetsova, S. W. Koch, J. Hader und J. V. Moloney: *Microscopic simulation of semiconductor lasers at telecommunication wavelengths*. In: Optical and Quantum Electronics 38 (2006), S. 1005

Vorträge und Poster

C. Bückers, S. W. Koch, J. Hader, J. V. Moloney, B. Kunert, S. Liebich, K. Volz, W. Stolz, N. Koukourakis, N. C. Gerhardt und M. R. Hofmann, *Laser gain in dilute nitride Ga(NAsP) semiconductor quantum well structures on silicon substrate - a microscopic analysis*, International Conference on Optical and Optoelectronic Properties of Materials and Applications (ICOOPMA), Budapest (Ungarn), August 2010 (Vortrag)

C. Bückers, A. Bäumner, A. Thränhardt, J. Hader, J. V. Moloney, S. W. Koch, W. Zhang und T. Ackemann, *Analysis of in-well pumping of semiconductor lasers by microscopic gain calculations*, Materialforschungstag Mittelhessen, Gießen, Juli 2009 (Poster)

C. Bückers, S. W. Koch, A. Thränhardt, J. Hader, J. V. Moloney, C. Karcher, W. Heimbrodt, B. Kunert, K. Volz und W. Stolz, *Microscopic modeling of the optical properties of dilute nitride semiconductor gain materials*, Conference on Lasers and Electro-Optics/Europe (CLEO-Europe), München, Juni 2009 (Vortrag)

C. Bückers, A. Bäumner, A. Thränhardt, J. Hader, J. V. Moloney, S. W. Koch, W. Zhang und T. Ackemann, *Analysis of in-well pumping of semiconductor lasers by micorscopic gain calculations*, Conference on Lasers and Electro-Optics/Europe (CLEO-Europe), München, Juni 2009 (Poster)

C. Bückers, S. W. Koch, S. Imhof, A. Thränhardt, T. Ackemann, C. Karcher, W. Heimbrodt, B. Kunert, K. Volz, W. Stolz, J. Hader und J. V. Moloney, *Optical gain and carrier losses in vertical-external-cavity surface-emitting lasers*, Seminar des europäischen Graduiertenkollegs „Electron-Electron Interactions in Solids“, Ráckeve (Ungarn), April 2009 (Vortrag)

C. Bückers, S. W. Koch, A. Thränhardt, J. Hader und J. V. Moloney, *Quantum modeling of semiconductor laser devices*, Frühjahrstagung der Deutschen Physikalischen Gesellschaft, Symposium, Dresden, März 2009 (eingeladener Vortrag)

C. Bückers, S. Imhof, A. Thränhardt, S. W. Koch, C. Karcher, W. Heimbrodt, B. Kunert, S. Zinnkann, K. Volz, W. Stolz, J. Hader und J. V. Moloney, *Modelling of the optical properties of semiconductor laser materials*, Seminar des europäischen Graduiertenkollegs „Electron-Electron Interactions in Solids“, Riezlern (Österreich), August 2008 (Vortrag)

C. Bückers, S. Imhof, A. Thränhardt, S. W. Koch, J. Hader und J. V. Moloney, *Optical properties of dilute nitride Ga(NAsP) structures - a microscopic analysis*, Materialforschungstag Mittelhessen, Marburg, Juni 2008 (Poster)

C. Bückers, A. Thränhardt, S. W. Koch, J. Hader, J. V. Moloney, M. Rattunde, N. Schulz und J. Wagner, *Laser properties of (GaIn)Sb heterostructures - a microscopic evaluation*, Frühjahrs-

tagung der Deutschen Physikalischen Gesellschaft, Berlin, Februar 2008 (Vortrag)

C. Bückers, S. Imhof, A. Thränhardt, S. W. Koch, B. Metzger, S. Chatterjee, J. Hader, J. V. Moloney, M. Rattunde, N. Schulz, J. Wagner, D. L. Huffaker, G. Balakrishnan, T. J. Rotter und R. Bedford, *Theoretical modeling and experimental analysis of bandstructure and gain in long-wavelength heterostructures*, Advanced Semiconductor Materials Workshop, Tucson (Arizona, USA), Februar 2008 (Vortrag)

C. Bückers, A. Thränhardt, S. W. Koch, J. Hader, J. V. Moloney, M. Rattunde, N. Schulz und J. Wagner, *Laser properties of (GaIn)Sb heterostructures - a microscopic evaluation*, Internationale Wilhelm und Else Heraeus-Sommerschule „Photonics Design“, Rauischholzhausen, September 2007 (Poster)

C. Bückers, A. Thränhardt, C. Schlichenmaier, S. W. Koch, J. Hader und J. V. Moloney, *Microscopic modelling of novel materials for semiconductor lasers*, Seminar des europäischen Graduiertenkollegs „Electron-Electron Interactions in Solids“, Ráckeve (Ungarn), August 2007 (Vortrag)

C. Bückers, A. Thränhardt, C. Schlichenmaier, S. W. Koch, J. Hader, J. V. Moloney, G. Blume, P. J. Klar, G. Weiser, S. R. Johnson, J.-B. Wang, Y.-H. Zhang, M. Rattunde, N. Schulz und J. Wagner, *Mikroskopische Simulation optischer Eigenschaften von Ga(AsSb) und (GaIn)Sb-Heterostrukturen*, Materialforschungstag Mittelhessen, Rauischholzhausen, Juli 2007 (Vortrag)

C. Bückers, G. Blume, A. Thränhardt, C. Schlichenmaier, S. W. Koch, P. J. Klar, G. Weiser und S. W. Koch, *Optical characterisation of Ga(AsSb) heterostructures*, Frühjahrstagung der Deutschen Physikalischen Gesellschaft, Regensburg, März 2007 (Vortrag)

Danksagung

An dieser Stelle möchte ich all denen danken, die zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen haben. Mein herzlicher Dank gilt...

- ... *Prof. Dr. Stephan W. Koch* für die engagierte Betreuung und stete Unterstützung
- ... *Prof. Dr. Angela Thränhardt* für viele gute Ratschläge und Gespräche
- ... *Ada Bäumner, Sebastian Imhof, Dr. Eckhard Kühn* und *Dr. Bernhard Pasenow* für erhellende Diskussionen
- ... *Dr. Jörg Hader* für vielfältige Anregungen und mannigfache Hilfe
- ... *Prof. Dr. Jerome V. Moloney* für zahlreiche Kooperationen
- ... *Prof. Dr. Wolfgang Stolz, Prof. Dr. Kerstin Volz, Dr. Bernardette Kunert* und *Sven Liebich* für die konstruktive Zusammenarbeit im Rahmen der gemeinsamen Projekte zum Ga(NAsP)-basierten Material
- ... *Prof. Dr. Martin R. Hofmann, Dr. Nils C. Gerhardt* und *Nektarios Koukourakis* für die konstruktive Zusammenarbeit im Rahmen der gemeinsamen Projekte zum Ga(NAsP)-basierten Material
- ... *Prof. Dr. Wolfram Heimbrod* und *Christian Karcher* für die konstruktive Zusammenarbeit im Rahmen der gemeinsamen Projekte zum Ga(NAsP)-basierten Material
- ... *Prof. Dr. Wolfgang W. Rühle, PD Dr. Sangam Chatterjee* und *Björn Metzger* für die konstruktive Zusammenarbeit im Rahmen der gemeinsamen Projekte zum (AlGaIn)(AsSb)-basierten Material
- ... *Prof. Dr. Joachim Wagner, Dr. Marcel Rattunde* und *Dr. Nicola Schulz* für die konstruktive Zusammenarbeit im Rahmen der gemeinsamen Projekte zum (AlGaIn)(AsSb)-basierten Material
- ... *Dr. Thorsten Ackemann* für die konstruktive Zusammenarbeit im Rahmen der gemeinsamen Projekte zum (AlGaIn)As-basierten VECSEL
- ... der AG Halbleitertheorie und der AG Experimentelle Halbleiterphysik für das kollegiale und angenehme Arbeitsklima
- ... dem europäischen Graduiertenkolleg „Electron-Electron Interactions in Solids“ für den anregenden Austausch
- ... meinen Eltern und meinen Schwestern für ihre Unterstützung